



TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO

LASSE TUOMINEN

**PALAMISEN MALLINNUS SUURTEN PYÖRTEIDEN
SIMULOINNISSA**

Diplomityö

Tarkastaja: professori Antti Oksanen
Tarkastaja ja aihe hyväksytty Kone- ja
automaatiotekniikan tiedekuntaneuvoston
kokouksessa 6. huhtikuuta 2011

TIIVISTELMÄ

TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO

Konetekniikan koulutusohjelma

TUOMINEN, LASSE: Palamisen mallinnus suurten pyörteiden simuloinnissa
Diplomityö, 37 sivua

Huhtikuu 2011

Pääaine: Voimalaitos- ja polttotekniikka

Tarkastaja: professori Antti Oksanen

Avainsanat: LES, palamismalli, Flamelet, EDC, PaSR

Suurin osa maailman primäärienergiasta tuotetaan erilaisilla polttoprosesseilla. Matemaattisen mallinnuksen avulla voidaan nopeuttaa kehitysprosesseja sekä saada tietoa, jota ei ole kokeellisesti saatavissa. Suuren pyörteiden simuloinnissa (LES) turbulenssin suuret pyörteet lasketaan tarkasti ja pienet mallinnetaan. LES laskennassa saadaan tarkempaa tietoa virtauksesta ja sekoittumisesta kuin perinteisillä menetelmillä.

Kaikki kemiallisten reaktioiden kokoluokat ovat pienempiä kuin pienimpien ratkaistujen pyörteiden kokoluokat. Tämän vuoksi kaikki kemialliset ilmiöt pitää mallintaa. Työssä esitellään erilaisia tapoja mallintaa palamista. Flamelet-malleilla saadaan helposti pienennettyä virtaussimuloinnin kuormitusta. Flamelet-mallit hyödyntävät seososuuden käsitettä, jolla eri aineiden ja energian siirtoyhtälöt saadaan kirjoitettua yhden siirtoyhtälön avulla. Flamelet-malleilla ei voida perustapauksessa huomioida ei-adiabaattisia ilmiöitä. Tärkeimmät ei-adiabaattiset ilmiöt ovat säteily ja lämmönsiirto polttolaitteen seinämällä. Lisäämällä flamelet kirjastoon entalpiaero parametriksi ja ratkaisemalla virtauslaskennassa energialle oma siirtoyhtälö saadaan huomioitua edellä mainitut tekijät. EDC- ja PaSR-malleilla kaikille mukana oleville aineille ratkaistaan omat siirtoyhtälöt, joiden lähdeterminit mallinnetaan ottamaan huomioon turbulenssin aiheuttama sekoittuminen. Kemiallisten lähdeterminien mallintaminen perustuu molemmissa malleissa siihen, että osa laskentakopin aineista oletetaan reagoivan täydellisesti sekoittuneen reaktorin tavoin, minkä jälkeen aineet sekoittuvat reagoimattoman osuuden kanssa.

Flamelet-malleja käyttämällä mallinnuksessa pystytään tehokkaasti pienentämään laskentakuormaa, koska ratkaistavien siirtoyhtälöiden lukumäärä ei riipu kemiallisen reaktiomekanismin monimutkaisuudesta. Kuitenkin ei-adiabaattiset ilmiöt näyttelevät hyvin tärkeää osaa todellisten polttolaitteiden mallinnuksessa, tämän takia sekoitusmallit ovat houkuttelevia, koska niissä näiden ilmiöiden huomioiminen on helpompaa.

Työn kuluessa mallinnettiin BERL poltinta, joka osoittautui hankalaksi. Laskenta oli hidasta ja käytetty laskentakoodi herkkä kaatumaan. Tämän vuoksi ei saatu julkaisukelpoisia tuloksia työssä esitettäväksi.

ABSTRACT

TAMPERE UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

Master's Degree Programme in Mechanical Engineering

TUOMINEN, LASSE: Combustion Modelling in Large Eddy Simulation

Master of Science Thesis, 37 pages

April 2011

Major: Power Plant and Combustion Technology

Examiner: Professor Antti Oksanen

Keywords: LES, combustion, Flamelet, EDC, PaSR

The majority of the primary energy of the world is produced with different combustion processes. Mathematical modelling can be used to accelerate development processes and to obtain information which cannot be experimentally obtained. In large eddy simulation (LES) the big eddies of turbulence are calculated exactly and the small eddies are modelled. More accurate information about the fluid flow and mixing is obtained with the LES calculation than traditional methods.

The length scale of chemical reactions is smaller than the length scale of the smallest solved eddies. Because of this, all the chemical phenomena must be modelled. In the thesis different ways to model combustion are shown. With flamelet models it is easy to reduce the calculation load of the simulation. The flamelet models utilise the concept of the mixture fraction where the transfer equations for species and energy will be written with one transfer equation. With the flamelet models non-adiabatic phenomena cannot be modelled in the basic case. The most important non-adiabatic phenomena are the radiation and the heat transfer on the walls. By adding enthalpy defect as a parameter to the flamelet library and solving the transfer equation for the energy, non-adiabatic phenomena can be modelled with flamelet model. With the EDC and PaSR models the transfer equations are solved to all species and the source terms are modelled to take into consideration the mixing caused by the turbulence. The modelling of chemical source terms in both models is based on the idea that part of the control volume reacts like a perfectly stirred reactor and after this reacted and unreacted parts are mixed.

With flamelet models it is possible to effectively reduce the calculation load because the number of the transfer equations to be solved does not depend on the complexity of the chemical reaction mechanism. However, the non-adiabatic phenomena act a very important part in real burning devices, because of this the eddy break up models are tempting because in them it is easier to pay attention to these phenomena.

During the thesis work the BERL burner was modelled which proved to be difficult. The calculation was slow and the calculation code used, sensitive to crash. Because of this, results fit for publication were not got.

ALKUSANAT

Tämä työ on tehty syksyn 2010 ja kevään 2011 aikana Tampereen teknillisen yliopiston Energia- ja prosessitekniikan laitoksella, jossa työtä ovat rahoittaneet sekä Metso Power Oy että Tekes-projekti Flophy.

Kiitän erityisesti työni ohjaajaa professori Antti Oksasta ohjauksesta ja tuesta työn aikana.

Haluan myös kiittää Ville Tossavaista ja Aku Karvista käytännön vinkeistä ja avusta.

Kiitän vanhempiani ja ystäviäni tuesta ja kannustuksesta.

Tampereella 19. huhtikuuta 2011

Lasse Tuominen
lasse.tuominen@tut.fi

SISÄLLYS

1	Johdanto	1
2	Hallitsevat yhtälöt	3
2.1	Virtausyhtälöt	3
2.2	Energiayhtälö	3
2.3	Aineyhtälöt	4
3	Suurten pyörteiden simulointi	6
3.1	Yleistä	6
3.2	Yhtälöiden suodatus	7
3.3	Alihilamallit	10
3.4	Dynaamiset mallit	10
4	Palamisen teoriaa	13
4.1	Yleistä	13
4.2	Flamelet-malli	13
4.2.1	Seososuus	13
4.2.2	Flamelet-oletus	16
4.2.3	Ei-adiabaattinen flamelet-malli	19
4.2.4	Edistymismuuttuja/Flamelet -malli	20
4.3	Eddy Dissipation Concept	21
4.4	Osittain sekoittuneen reaktorin -malli	23
5	Mallinnettuja polttolaitteita	26
5.1	Sadasivunin Flamelet-mallien vertailu	26
5.2	Panjwanin EDC-malli	27
5.3	Kaasuturbiinin polttokammio	30
6	Yhteenveto	33
	Lähteet	35

TERMIT JA SYMBOLIT

Latinalaiset aakkoset

c	Konsentraatio
C_p	Ominaislämpökapasiteetti vakiopaineessa
D_k	Diffusiviteetti
D_k	Diffuusiokerroin
G	LES suodatin
h	Entalpia
h_f	Muodostumis entalpia
k	Aaltoluku
k_c	Leikkautumis aaltoluku
p	Paine
Q	Lämmöntuotto
q	Alihilan kineettinen energia
S_{ij}	Venymänopeustensori
T	Absoluuttinen lämpötila
t	Aika
u_i	Nopeuskomponentti
$V_{k,i}$	Aineen k diffuusionopeus suunnassa i .
W_k	Aineen k moolimassa
x_i	Paikka koordinaatti
X_k	Mooliosuus
Y_k	Massaosuus

Kreikkalaiset aakkoset

α	Terminen diffusiviteetti
α_t	Turbulentti terminen diffusiviteetti
χ	Hienorakenteen reagoiva massaosuus
Δ	Laskentakopin pituusskaala
δ_{ij}	Kroneckerin delta
η	Kolmogorovin skaala
Γ	Gamma-funktio

γ_λ	Hienorakenteen massaosuus
λ	Keskimääräinen vapaa välimatka
λ	Lämmönjohtavuus
μ	Dynaaminen viskositeetti
ν	Kinemaattinen viskositeetti $\nu = \mu/\rho$
ν_k	Aineen k stoikiometrien kerroin reaktioyhtälössä
$\dot{\omega}_i$	Reaktionopeus
$\dot{\omega}_T$	Reaktioissa vapautuva lämpö
ρ	Tiheys
τ^*	Hienorakennereaktorin viipymäaika
τ_{ij}	Jännitystensori

Lyhenteet

CFD	Computational Fluid Dynamics, Laskennallinen virtaus dynamiikka
DNS	Direct Numerical Simulation, Suora numeerinen simulointi
DTM	Discrete Transfer Method
EDC	Eddy Dissipation Concept, Pyörteiden hajoamismalli
ISAT	In-Situ Adaptive Tabulation, Laskennan aikainen kemiallisen kinetiikan taulukointi.
LES	Large Eddy Simulation, Suurten pyörteiden simulointi
PaSR	Partially Stirred Reactor, Osittain sekoittunut reaktori
PSR	Perfectly Stirred Reactor, Täydellisesti sekoittunut reaktori
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes, Reynoldsin keskiarvotetut Navier-Stoksin yhtälöt

Muut symbolit

Kn	Knudsenin luku
ℓ	Pienin virtauksen pituusskaala
Le	Lewisin luku. Termisen ja molekylärisen diffusiviteetin suhde.
\mathcal{M}_k	Aineen k kemiallinen tunnus (CO_2 , H_2O , jne.)
Pr	Prandtl'n luku
Sc	Schmidt'n luku

1 JOHDANTO

Suuri osa maailman primäärienergiasta tuotetaan eri tyyppisillä polttoprosesseilla. Fossiilisten polttoaineiden käytön aiheuttamat ilmansaasteet ja ilmaston lämpeneminen pakottavat etsimään korvaavia tapoja tuottaa energiaa sekä erityisesti tehostamaan ja parantamaan jo olemassa olevia. Biopolttoaineita käyttämällä pyritään vähentämään riippuvuutta fossiilisista polttoaineista ja vähentämään ilmaston lämpenemistä. Uusien biopolttoaineiden käyttöön ottaminen vaatii huomattavia määriä tutkimusta ja kehitystä. Tutkimuksen kautta voidaan kehittää kokonaan uusia polttolaitteita, jotka tehokkaasti ja puhtaasti polttavat uusia haastavia polttoaineita. Myös vanhat polttolaitteet vaativat muutostöitä, kun niitä modernisoidaan toimimaan uusilla polttoaineilla.

Laskennallisen virtausdynamiikan (CFD, Computational Fluid Dynamics) työkaluilla voidaan huomattavasti nopeammin ja halvemmalla tutkia ja testata polttolaitteiden toimintaa erilaisissa tilanteissa ja olosuhteissa. Tietokoneiden tehon yhä noustessa voidaan tarkastella entistä isompia ja monimutkaisempia tapauksia nopeammin ja tarkemmin. Pilot- ja demonstraatiolaitteistojen rakennus on hyvin kallista ja aikaa vievää toimintaa ja näin ollen mahdollista vain harvoille suurille yrityksille ja organisaatioille. Matemaattisilla mallinnustyökaluilla pystytään suorittamaan huomattava osa esivalmistelusta ja hahmottamaan polttolaitteiston toiminta, jolloin voidaan olla huomattavasti varmempia rakennettavan laitteiston lopullisesta toiminnasta. [25]

Matemaattisilla malleilla saadaan myös sellaista tietoa polttimien ja kattiloiden sisäisestä toiminnasta, joka ei kokeellisilla menetelmillä ole mahdollista. Korkeat lämpötilat ja oikeiden laitteiden suuri koko aiheuttavat usein ylipääsemättömiä ongelmia mittaustekniikalle.

Simuloinnilla ja mallinnuksella voidaan myös tutkia määrällisesti vähäisten päästöjen muodostumista sekä kulkeutumista. Päästöjen vähentämisessä usein tehokkain ja halvin keino on vaikuttaa niiden muodostumisherkkyyteen suoraan syntypaikassa. [25]

Nykyisillä malleilla saavutetaan poikkeuksetta hyvä kvalitatiivinen kuvaus tapahtumista ja pystytään ennustamaan muutosten vaikutus koko prosessiin. Kuitenkin käytännön ongelmissa täytyy käyttää huomattavasti yksinkertaistettuja malleja

virtaukselle sekä muille fysikaalisille ilmiöille. Käyttämällä niin sanottua suoraa simulointia (DNS, Direct Numerical Simulation) voidaan välttää turbulenssin mallintaminen simuloinnissa, koska siinä kaikki virtauksen pituus ja aikaskaalat ratkaistaan tarkasti. DNS on kuitenkin vielä pitkälle tulevaisuuteen käyttökelvoton käytännön insinööri-ongelmien ratkaisussa, koska sen vaatimat huimat laskentatehot ovat vielä tutkijoiden ja insinöörien saavuttamattomissa.

Suurten pyörteiden simulointi (LES, Large Eddy Simulation) on yksi askel kohti tarkempaa mallinnusta. Ajasta riippumaton RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) laskenta on tällä hetkellä numeerisen mallinnuksen perustyökalu ja sitä käytetään rutiininomaisesti virtaus- ja palamisongelmien ratkaisuun. Suurten pyörteiden simulointi on menetelmä DNS:n ja RANS:n välissä. RANS simuloinnissa kaikki turbulenssin kineettinen energia mallinnetaan ja suorassa simuloinnissa kaikki puolestaan lasketaan. LES laskennassa suuret energiaa sisältävät turbulenssin rakenteet ratkaistaan tarkasti ja vain pienet pyörteet mallinnetaan. Pienten pyörteiden oletetaan olevan suuressa määrin isotrooppisia eikä niihin vaikuta vallitseva virtaustilanne, jolloin niiden kuvaamiseen tarvittavat mallit voivat olla yksikertaisia ja vaativat vähemmän muutoksia eri virtauksissa. [25]

LES mallinnuksista saadaan RANS laskentaan verrattuna tarkempia tuloksia. Tärkeämpää on kuitenkin se, että tulokset ovat tarkemmat kuin RANS laskennassa, kuten esimerkiksi virtauksen taajuusspektrin ja painevärähtelyjen osalta [18]. Tällöin voidaan tehokkaammin tarkastella virtaus- ja palamisenilmiöiden aiheuttamia värähtelyjä rakenteissa.

Kappaleessa kaksi esitellään hallitsevat yhtälöt, joiden ratkaisuun kaikki jatkossa esiteltävät menetelmät perustuvat. Seuraavassa kappaleessa esitellään LES laskennan periaatteita ja matemaattista pohjaa. Neljännessä kappaleessa luodaan katsaus LES laskennassa käytettäviin palamismalleihin. Kappaleessa viisi tutustutaan edellä esitellyillä malleilla laskettuihin tuloksiin.

2 HALLITSEVAT YHTÄLÖT

2.1 Virtausyhtälöt

Virtausta kuvaavat yhtälöt koostuvat jatkuvuus- ja liikemääräyhtälöistä, joista jälkimmäisiä kutsutaan Navier-Stokesin yhtälöiksi. Edellä mainittujen yhtälöiden lisäksi turbulentin virtauksen laskentaan tarvitaan myös turbulenssisuureiden taseyhtälöt. Jatkuvuusyhtälö kuvaa massan häviämättömyyttä ja liikemääräyhtälö liikemäärän häviämättömyyttä Newtonin toisen lain mukaan. Yhtälöitä johdettaessa käytetään kontinuumioletusta, jonka mukaan ainetta voidaan tarkastella jatkuvana silloin kun Knudsenin luku on alle yhden. Knudsenin luku määritellään

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{\ell}, \quad (2.1)$$

jossa λ on keskimääräinen vapaa välimatka aineen molekyyliden välillä ja ℓ on pienin geometrinen virtauksen pituusskaala. Käytännön virtaustapauksissa tämä luku on useimmiten luokkaa 10^{-3} tai pienempi.

Seuraavassa esitellään yleiset hetkelliset yhtälöt. Jatkuvuusyhtälö muuttuvatiheyksiselle virtaukselle on

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

ja liikeyhtälö on

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i}, \quad (2.3)$$

jossa jännitystensori τ_{ij} on

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.4)$$

Yhtälössä μ on dynaaminen viskositeetti. Yhtälön (2.3) viimeinen termi kuvaa virtaukseen kohdistuvia tilavuusvoimia. [24, 22]

2.2 Energiayhtälö

Energiayhtälö voidaan kirjoittaa käyttäen useita eri suureita, kuten esimerkiksi kokonaisenergiaa, kokonaisentalpiaa, tuntuvaa entalpiaa tai lämpötilaa. Usein energiayh-

tälö muotoillaan tuntuvalle entalpiaalle, koska tuntevan sen implementointi laskenta-koodeihin on helppoa [22]. Kokonaisentalpiaa käytettäessä ei yhtälöön kuitenkaan tarvitse lisätä reaktiolähdetermiä, jolloin yhtälö yksinkertaistuu [18]. Tuntuvalle entalpialla esitettynä energiayhtälö on

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) = \underbrace{\frac{Dp}{Dt}}_{1.} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)}_{2.} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_k \right)}_{3.} + \underbrace{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{3.} + \underbrace{\dot{\omega}_T}_{4.} + \underbrace{Q}_{5.} . \quad (2.5)$$

Yhtälön viimeinen termi Q on ulkoiset energialähteet ja nielut, kuten esimerkiksi lämpösäteilyn ja sytytysenergian vaikutuksen. Toiseksi viimeinen termi $\dot{\omega}_T$ sisältää kemiallisissa reaktioissa vapautuvan energian ja se määrittellään

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k} \dot{\omega}_k , \quad (2.6)$$

jossa Δh_f on aineen muodostumislämpö, $\dot{\omega}_k$ aineen kemiallisen kinetiikan määräämä reaktionopeus ja N kaikkien aineiden lukumäärä. Kolmanneksi viimeinen termi (3.) on turbulenssin kineneettisen energian dissipaatiosta aiheutuva lämmön tuotto. Termi numero 2 on eri aineiden entalpiaeroista johtuva diffuusio, jossa V_k on aineen k diffuusionopeus. Fourierin lain mukaista lämmön diffuusiota kuvaa termi numero 1, jossa λ on lämmönjohtavuus.

Aliäänivirtauksissa, joissa Machin luku on pieni voidaan energiayhtälön painetermi Dp/Dt jättää pois [22]. Myös termi numero 3 voidaan jättää huomiotta. Palamisen seurauksena syntyvät lämpötilaerot ovat huomattavasti suurempia kuin dissipaation aiheuttama lämpötilan nousu. [22]

2.3 Aineyhtälöt

Palamisessa on aina mukana monia eri aineita. Koska palamisreaktioiden seurauksena aineita kuluu ja uusia syntyy, niin jatkuvuusyhtälön lisäksi eri aineille tarvitaan omat yhtälöt. [24, 22]

Yleinen, aineen k siirtoyhtälö voidaan kirjoittaa muotoon

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k , \quad (2.7)$$

jossa Y_k on aineen k massaosuus, $V_{k,i}$ aineen k diffuusionopeus suunnassa i ja $\dot{\omega}_k$ aineen reaktionopeus. Diffuusionopeuden V_k tarkka ratkaisu on mahdollista, mutta usein se on vaikeaa ja aikaa vievää [22], jolloin se on epäkäytännöllinen lähestymistapa virtauslaskennassa.

Mallinnettaessa usean aineen diffuusiota palamisen sovelluksissa käytetään useimmiten Hirschfelderin ja Curtiss'n aproksimaatiota [22]

$$V_k X_k = -D_k \nabla X_k, \text{ jossa } D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}} \quad (2.8)$$

Kaavassa oleva kerroin D_k on aineen k diffuusiokerroin verrattuna koko muuhun seokseen. Seoksen sisältäessä vain kahta eri ainetta supistuu Hirschfelderin ja Curtiss'n aproksimaatio Fick'n laiksi [22], jolloin siirtoyhtälöksi saadaan

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.9)$$

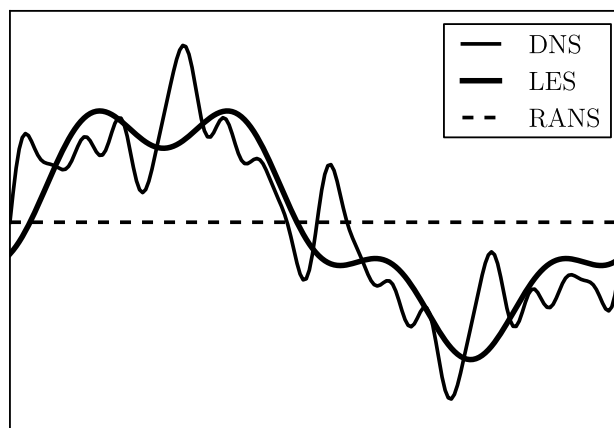
Edellä esitetty muoto aineiden siirtoyhtälölle on kätevä käyttää virtaussimuloinnissa, koska diffuusiokerroin D_k voidaan sitoa useissa tapauksissa termiseen diffusiviteettiin käyttäen Lewisin lukua, Le . Useimmissa käytännön palamistapauksissa $Le \approx 1$. [22]

3 SUURTEN PYÖRTEIDEN SIMULOINTI

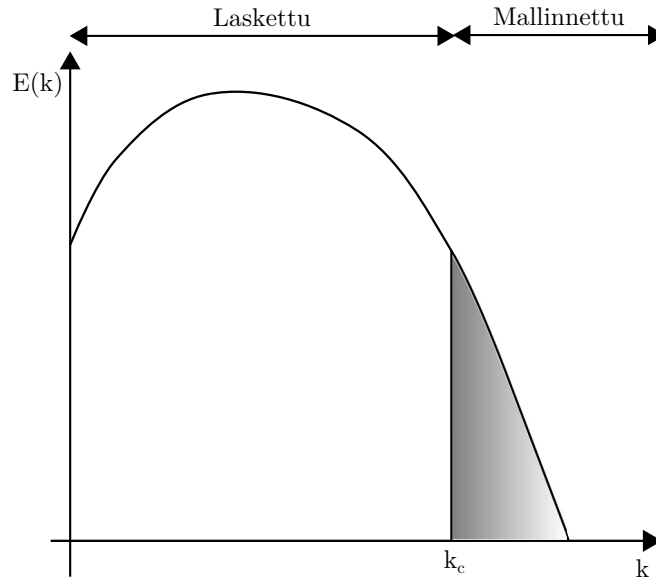
3.1 Yleistä

Suorassa simuloinnissa luvussa 2 esitellyt yhtälöt ratkaistaan suoraan ilman minkäänlaista mallintamista. Suoran simuloinnin käyttö on tänä päivänä vielä rajoittunutta, koska kaikkien pienimpienkin pituusskaalojen ratkaisu on hyvin raskasta. Käytännön insinööriyössä tänä päivänä käytetään RANS laskentaa, jossa kaikki turbulenssin kineettinen energia mallinnetaan. RANS laskennan tuloksena ilmiöistä saadaan vain karkea keskiarvo. Suoran simuloinnin ja RANS laskennan väliin sijoittuu LES laskenta, jossa vain suuret pyörteet lasketaan tarkasti. Kuvassa 3.1 on kaavamaisesti esitetty eri menetelmien erot.

Tyypillisesti LES laskennassa laskentaverkkoa suuremmat pyörteet lasketaan tarkasti ja pienemmät pyörteet mallinnetaan. Tämän vuoksi pienien pyörteiden malleja usein kutsutaan alihilamalleiksi. [5, 28]



Kuva 3.1: Periaatekuva LES suodatuksesta. Kuvaan piirretty tarkka profiili (DNS), suodatettu LES profiili ja RANS keskiarvo.



Kuva 3.2: Turbulenssin kineettisen energian jakautuminen aaltoluvun funktiona.

Periaatteellisessa kuvassa 3.2 on esitetty turbulenssin energiaspektri aaltoluvun funktiona. RANS laskennassa koko kineettisen energian spektri mallinnetaan, eikä yhtään kineettistä energiaa lasketa tarkasti. Käytettäessä suoraa simulointia kaikki turbulenssin energia lasketaan tarkasti. LES-laskennassa turbulentit liikkeet lasketaan tarkasti aaltolukuun k_c asti. Aaltoluvun ollessa yli k_c :n turbulentit liikkeet mallinetaan. Pienillä aaltoluvun k arvoilla ovat turbulenssin suuret eniten energiaa sisältävät pyörteet. Nämä ovat hyvin epäisotrooppisia ja ne riippuvat voimakkaasti virtaustapauksen geometriasta. Pyörteiden hajoamismekanismin kautta energia siirtyy pienempiin pyörteisiin eli suuremmille aaltoluvuille. Lopulta energia päätyy pienimpiin pyörteisiin joiden koko on Kolmogorovin skaalassa η ja siellä kaikki energia dissipoituu lämmöksi. [24]

3.2 Yhtälöiden suodatus

Suurten pyörteiden tarkkaa laskemista varten luvussa 2 esiteltyt tarkat hetkelliset yhtälöt suodatetaan, jolloin vain suurten pyörteiden informaatio jää yhtälöihin jäljelle. Kuvassa 3.1 on esitetty nopeuden tarkka profiili yhdellä ajan hetkellä (DNS). Kuvaan on paksulla viivalla piirretty hetkellisen nopeuden suodatettu arvo (LES). Suodatuksen jälkeen nopeuden profilista on hävinnyt pienimmän skaalan heilahtelut. Suodatettu profiili kuitenkin mukaillee tarkassa profilissa olevia suuren skaalan liikkeitä.

Suodatuksessa poistetaan muuttujista alihilan osuus, jolloin jäljelle jää vain suurten pyörteiden osuus. Suodatuksen seurauksena yhtälöihin muodostuu jäännös-

termejä, joiden sulkemiseen vaaditaan alihilamallit. Suodatettu muuttuja $\bar{\phi}$ saadaan seuraavasti

$$\bar{\phi} = \int \phi(x, t) G(x - y) dy, \quad (3.1)$$

jossa $G(x)$ on suodatin [8]. Näin hetkellinen muuttuja saadaan jaettua suodatettuun ja alihila osuuteen

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'. \quad (3.2)$$

Suodattimesta voidaan helposti osoittaa, että integrointi ja derivointi kommutoivat, eli ovat vaihdannaiset, kaavassa (3.1), jolloin saadaan

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} = \int \frac{\partial \phi}{\partial x} G(x - y) dy = \frac{\partial}{\partial x} \int \phi G(x - y) dy = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x}. \quad (3.3)$$

Suodattamalla liikeyhtälö (2.3) edellä mainitulla tavalla saadaan

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \bar{f}_k. \quad (3.4)$$

Ottamalla käyttöön Favre keskiarvot eli massapainotettu keskiarvo

$$\tilde{\phi} = \frac{\bar{\rho} \bar{\phi}}{\bar{\rho}} \quad (3.5)$$

saadaan hetkellisten suureiden keskiarvon sisältävät termit $\bar{\rho} \tilde{\phi}$ lausuttua ratkaistujen suureiden avulla. Favre keskiarvotetuksi liikeyhtälöksi saadaan

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{f}_k. \quad (3.6)$$

Toinen ongelma yhtälön (3.6) konvektiotermissä $\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i}$ on hetkellisten nopeuksien tulo. Lisäämällä ja vähentämällä yhtälöön (3.6) termi $\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) / \partial x_i$ saadaan liikeyhtälö muokattua muotoon

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}}{\partial x_i} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{f}, \quad (3.7)$$

jossa

$$T_{ij} = \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (3.8)$$

on alihilan jäännösjännitys. Termiin sisältyy tuntematon nopeustermi $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$, joka vaatii mallintamista. Eri tapoja termin mallintamiseen esitellään luvussa 3.3. [8, 22]

Yhtälön (2.5) sievennetty muoto on

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) = \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_k \right) + \dot{\omega}_T + Q, \quad (3.9)$$

josta suodatetuksi energiayhtälöksi saadaan

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \sum_{k=1}^N \widetilde{V_{k,i} Y_k h_k} \right) \\ + \bar{\omega}_T + \bar{Q} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{h} - \widetilde{u_i h}) \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Paineen keskiarvotettu kokonaisderivaatta on

$$\frac{\overline{Dp}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}}. \quad (3.11)$$

Yhtälön viimeinen paine-nopeustermi useimmiten mallinnetaan $\tilde{u}_i (\partial \bar{p} / \partial x_i)$ [22]. Energiayhtälön lämmönjohtumistermi $\overline{\lambda \partial T / \partial x_i}$ joko jätetään huomiotta tai mallinnetaan kaavalla $\bar{\lambda} (\partial \bar{T} / \partial x_i)$. Entalpiaeroista johtuva diffuusio on usein hallitseva [22]. Energiayhtälön viimeinen alihilan energiatermi mallinnetaan useimmin käyttäen yksinkertaista gradienttidiffuusio oletusta, joka on

$$\tilde{u}_i \tilde{h} - \widetilde{u_i h} = \alpha_t \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i}, \quad (3.12)$$

jossa α_t on turbulentti terminen diffusiviteetti, joka määritellään kaavasta

$$\text{Pr}_t = \frac{\mu_t}{\rho \alpha_t}, \quad (3.13)$$

jossa Pr_t on turbulentti Prandtl-luku. [22]

Hetkellisen aineyhtälön (2.7) suodatettu muoto on

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\overline{V_{k,i} Y_k} - \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) \right] + \bar{\omega}_k, \quad (3.14)$$

jossa alihilan termi $\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k$ mallinnetaan useimmiten samantyyppisellä käsittelyllä kuin vastaava energiayhtälön termi eli käyttäen gradienttidiffuusio oletusta, jolloin termille saadaan

$$\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i}. \quad (3.15)$$

Yhtälössä esiintyvä Sc_t on turbulentti Schmidt'n luku, joka määritellään viskositeetin ja aineen k diffuusiokvontin suhteena. [22]

Laminaari diffuusionopeustermi $\overline{V_{k,i} Y_k}$ mallinnetaan lisäämällä edelliseen gradienttidiffuusio oletukseen laminaarin diffuusion osuus. Usein myös termi jätetään huomiotta, oletta- malla korkea turbulenssin taso, jolloin turbulenssin aiheuttama diffuusio on huomattavasti laminaaria diffuusiota hallitsevampi prosessi. Yhtälön viimeisen suodatetun reaktionopeustermien käsittelyyn paneudutaan seuraavassa luvussa. [22]

3.3 Alihilamallit

Suodatetusta liikeyhtälöstä 3.7 ja energiayhtälöstä 3.10 löytyvät alihilan jäännösjännitykset, ja lisäksi alihilan jäännösennergian vuotermit pitää sulkea. Sulkemisen seurauksena termit tulee lausutuksi ratkaistujen keskiarvosuureiden avulla.

Liikeyhtälön jäännösjännitysten (yhtälö (3.8)) mallintamiseen käytetään ensin Boussineq'n oletusta, jolloin saadaan

$$T_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \bar{\rho} q^2 \delta_{ij}. \quad (3.16)$$

Mallinnusta vaativat termit edellisessä yhtälössä ovat pyörreviskositeetti μ_t ja alihilan kineettinen energia $\bar{\rho} q^2$. [24, 22, 18]

Yleisimmin termi $-1/3 \bar{\rho} q^2 \delta_{ij}$ lisätään painetermiin, jolloin saadaan modifioitu paine, joka ratkaistaan laskennassa. Jos mallinnuksessa ollaan kiinnostuneita paineen oikeasta arvosta, esimerkiksi kavitaatiota tutkittaessa, pitää termin mallintamiseen kiinnittää enemmän huomiota [8].

Smagorinskyn alihilamalli on ensimmäisiä kehitettyjä alihilamalleja ollen edelleen yksi käytetyimmistä malleista. Malli käyttää pyörreviskositeettioletusta, jossa alihilas- sa tapahtuvan dissipaation oletetaan noudattavan Kolmogorovin $k^{-5/3}$ oletusta. Malli on muunnos Prandtl'n sekoituspituusteoriasta sovitettuna alihilan mallintamiseen. Smagorinskyn mallissa alihilan pyörreviskositeetti on

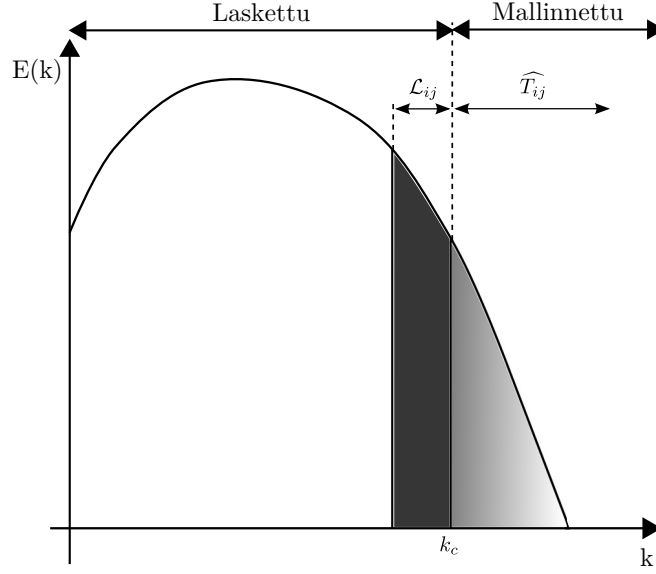
$$\mu_t = \bar{\rho} C_S^2 \Delta^2 \left(2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} \right)^{1/2}, \quad (3.17)$$

jossa C_S on mallivakio ja Δ laskentakopin pituusskaala. Vakion C_S arvoksi annetaan usein 0,2, mutta se riippuu virtaustilanteesta sekä -geometriasta. Smagorinskyn mallin tiedetään olevan erityisesti seinämien läheisyydessä liian dissipatiivinen. Käytettäessä dynaamisia malleja vakion C_S arvo määritetään virtaustilanteen mukaan eri laskentapisteissä. [22, 8]

3.4 Dynaamiset mallit

Dynaamisten mallien tarkoituksena on mallintaa alihilan dissipaatiota pienimpien ratkaistujen pyörteiden perusteella. Tämä tehdään kaksoissuodattamalla muuttujat. Tällöin edellä esitetyn Smagorinskyn mallin vakio C_S määritetään dynaamisesti siten, että se sopii optimaalisella tavalla virtaukseen. [4]

Kaksoissuodatuksessa on käytössä kaksi suodatinta, joista toisen suodatus on voimakkaampaa. Kapeampaa suodatinta merkitään yläviivalla \bar{u} ja leveämpää suodatinta yläkulmalla \hat{u} . Kapeampi suodatin on sama kuin käytettävä LES-suodatin, eli se on laskentaverkon määrittämä. Leveämpi suodatin on kertoimen α verran suurempi kuin kapea suodatin.



Kuva 3.3: Turbulenssin kineettisen energian ratkaistu ja mallinnettujen osien jakaantuminen käytettäessä dynaamisia alihilamalleja. Ratkaistun energian perusteella mallinnetaan alihilan osuus.

Alihilan jäännösjännitys \mathcal{T}_{ij} muuttujalle \widehat{u} voidaan kirjoittaa

$$\mathcal{T}_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i} \widehat{u_j}. \quad (3.18)$$

Jos ratkaistua nopeuskenttää \bar{u}_i käsitellään hetkellisenä kenttänä, voidaan silloin ratkaistuille nopeuksille kirjoittaa

$$\mathcal{L}_{ij} = \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i} \widehat{\bar{u}_j}. \quad (3.19)$$

Käyttämällä leveää suodatinta alihilan jäännösjännitykseen (vrt. yhtälö (3.8), esi-tyksen yksinkertaistamiseksi käytetään kokoon puristumatonta tapausta) saadaan

$$\widehat{T}_{ij} = \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i} \widehat{\bar{u}_j}. \quad (3.20)$$

Laskemalla yhteen yhtälöt (3.19) ja (3.20) sekä käyttämällä yhtälöä (3.18) saadaan, niin kutsuttu Germanon identiteetti

$$\mathcal{L}_{ij} = \mathcal{T}_{ij} - \widehat{T}_{ij}. \quad (3.21)$$

Kuvassa (3.3) on esitetty Germanon identiteetin termien sijoittuminen turbulenssin spektriin suhteessa ratkaistuun ja mallinnettuun turbulenssin kineettiseen energiaan.

Germanon identiteetin oikeanpuoleiset termit pitää mallintaa, kun taas vasemmanpuoleinen termi voidaan suoraan laskea ratkaistusta nopeuskentästä. Käyttämällä Smagorinskyn mallia erikseen molempiin oikean puolen termeihin saadaan

$$\widehat{T}_{ij} - \frac{1}{3} \widehat{T}_{ll} \delta_{ij} = 2 \widehat{\mathcal{A}_{ij} C}; \quad \mathcal{A}_{ij} = (\Delta x)^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \quad (3.22)$$

$$\mathcal{T}_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll}\delta_{ij} = 2\mathcal{B}_{ij}C; \quad \mathcal{B}_{ij} = \alpha^2 (\Delta x)^2 \left| \widehat{\bar{S}} \right| \widehat{\bar{S}}_{ij}. \quad (3.23)$$

Vähentämällä edelliset yhtälöt keskenään ja käyttämällä Germanon identiteettiä saadaan

$$\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{L}_{ll}\delta_{ij} = 2\mathcal{B}_{ij}C - 2\widehat{\mathcal{A}}_{ij}C, \quad (3.24)$$

joka yhdistää tuntemattoman mallivakion C laskettavissa oleviin jännityksiin, jotka vuorostaan riippuvat ratkaistusta nopeuskentästä.

Yhtälöä ratkaistaessa täytyy vakio C poistaa suodattimesta yhtälön viimeisessä termissä, jolloin C :lle on viisi yhtälöä, ja näin yhtälöryhmä on yli määritelty. Lesieur *et. al.* [8] esittää muutamia kirjallisuudesta löytyviä tapoja ratkaista C :n arvo. Germanon [4] käyttämässä tavassa yhtälö (3.24) kerrotaan ns. venymänopeudella \bar{S}_{ij} , jolloin saadaan

$$C = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{L}_{ij}\bar{S}_{ij}}{M_{ij}\bar{S}_{ij}}, \quad (3.25)$$

jossa $M_{ij} = \mathcal{B}_{ij} - \widehat{\mathcal{A}}_{ij}$. Tämä muotoilu ei kuitenkaan toimi palavissa sovelluksissa, koska se vaatii virtauksen olevan kokoonpuristumaton. [13]

Kokoonpuristuvissa virtauksissa käytetään Yoshizawan esittämää mallia, jossa alihilan energian osuus mallinnetaan erikseen ja alihilan parametrisointiin käytetään Smagorinskyn mallia (3.16). Yoshizawa määrittelee alihilan kineettisen energian q kaavalla [13]

$$q^2 = C_I 2\bar{\rho}\Delta^2 \left| \bar{S} \right|^2 = C_I \alpha. \quad (3.26)$$

Lilly on esittänyt Germanon identiteettiin perustuvat pienimmän neliösumman menetelmällä johdetut dynaamiset arvot vakioille C_S ja C_I , jotka ovat [13]

$$C_S^2 = \frac{\mathcal{L}_{ij}M_{ij}}{M_{kl}M_{kl}} \quad (3.27)$$

ja

$$C_I = \frac{\mathcal{L}_{kk}}{\beta - \widehat{\alpha}} \quad (3.28)$$

jossa

$$\beta = -2\widehat{\Delta}^2\bar{\rho} \left| \widehat{S} \right| \left(\widehat{S}_{ij} - \frac{1}{3}\widehat{S}_{kk}\delta_{ij} \right). \quad (3.29)$$

4 PALAMISEN TEORIAA

4.1 Yleistä

Kaikki kemiallisen reaktioiden pituusskaalat ovat pienempiä kuin laskentaverkon yksittäisen kopin koko, jolloin nämä termit pitää kokonaisuudessaan mallintaa. Mallinnuksessa ei tällöin suoraan voida hyödyntää LES:n tuomia etuja, jossa osa virtauksesta on tarkasti ratkaistu ja vain pienet pyörteet on mallinnettu. Pienten pyörteiden mallintamisen oikeutus ajatellaan kuitenkin olevan se, että toisin kuin suuret pyörteet pienet ovat isotrooppisia eli ne eivät riipu virtauksen geometriasta samoin kuin isot pyörteet. Suuret pyörteet johtuvat paljon enemmän virtauksen geometriasta.

Tässä esitellään vain kaasun palamiseen liittyviä malleja. Kiinteän polttoaineen palamisessa pitää käyttää erityyppistä lähestymistapaa. Kuitenkin esimerkiksi biomassoja poltettaessa jopa 80 % polttoaineen massasta haihtuu ja palaa tämän jälkeen kaasufaasissa. Samoin nestemäiset polttoaineet ensin höyrystyvät ja palavat kaasuna. Jäljelle jääneen jäännöshiilen poltto pitää mallintaa eritavoin.

Säteily on tärkeä lämmönsiirron muoto tulipesissä. Tässä esitetyissä tavoissa mallintaa palamista säteily huomioidaan lisäämällä se lähdeterminksi energiayhtälöön. Tarkemmin säteilyn mallintamistapoihin ei syvennyttä.

4.2 Flamelet-malli

4.2.1 Seososuus

Seososuuden käsitteen avulla voidaan aine- ja energiayhtälöt esittää yhden muuttujan avulla. Tällöin virtauslaskennassa ratkaistavien yhtälöiden määrä pienenee. Käytettäessä monimutkaisempia monivaiheisia reaktiomekanismeja laskentatyön vaatima aika voi pienentyä huomattavasti. Kaikki aineet ja yleisimmässä tapauksessa energia sisällytetään seososuuteen.

Aineyhtälöt noudattavat kukin yleistä skalaarin siirtoyhtälöä (2.9). Yksinkertaisimmassa tapauksessa, jossa on vain yksi reaktio, yhtälö on muotoa



jossa F , O ja P ovat polttoaineen, hapettimen ja tuotteiden aineiden tunnuksat. n_i on reaktion stoikiometriset kertoimet. Tällöin polttoaineen, hapettimen ja lämpötilan siirtoyhtälöt ovat:

$$\frac{\partial(\rho Y_F)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_F) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_F \frac{\partial Y_F}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_F \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_O)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_O) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_O \frac{\partial Y_O}{\partial x_i} \right) + s \dot{\omega}_F \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F \quad (4.4)$$

Polttoaineen ja hapettimen reaktionopeudet liittyvät toisiinsa kaavalla $\dot{\omega}_O = s \dot{\omega}_F$, jossa s on hapettimen ja polttoaineen massastoikiometrinen suhde $s = \frac{n_O W_O}{n_F W_F}$. Lämpötilan yhtälössä Q on reaktion lämmöntuotto. [22]

Kaikille reaktioon osallistuville aineille oletetaan yhtäsuuret diffusiviteetit eli $D = D_F = D_O$ sekä terminen ja molekyyläminen diffusiviteetti yhtä suuriksi. Termisen ja molekyyläminen diffusiviteetin suhdetta kutsutaan Lewisin luvuksi Le , joka oletetaan olevan $Le = 1$. Laskemalla edellä mainitut yhtälöt (4.2)–(4.4) pareittain yhteen saadaan muodostettua uudet muuttujat Z_1 , Z_2 ja Z_3 , jotka ovat määritelty lausekkeilla

$$Z_1 = s Y_F - Y_O \quad Z_2 = \frac{C_p}{Q} T - Y_F \quad Z_3 = \frac{s C_p}{Q} T - Y_O \quad (4.5)$$

Yhteenlaskun seurauksena yhtälöiden (4.2)–(4.4) lähdeterminit kumoutuvat. Tämän vuoksi muuttujia kutsutaan säilyviksi skalaareiksi. Uudet muuttujat noudattavat kaikki samaa siirtoyhtälöä

$$\frac{\partial \rho Z_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Z_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Z_k}{\partial x_i} \right), \quad (4.6)$$

mutta niillä kaikilla on eri reunaehdot. [22]

Yhtälöitä yhteenlaskettaessa pitää olettaa kaikille yhtälöille samantyyppiset reunaehdot. Aineille luonnolliset reunaehdot ovat vakioarvo sisääntulossa ja nollagradientti seinämällä. Nämä ehdot siirtyvät myös lämpötilan yhtälöön ja näin ollen myös lämpötilan gradientti seinämällä tulee olla nolla eli lämpövirta on nolla seinillä, jolloin kaikki uudet muuttujat Z_i kuvaavat adiabaattista tilannetta. [17] Kappaleessa 4.2.3 perehdytään menetelmiin em. rajoituksen kiertämiseksi.

Normalisoidaan muuttujat Z_k kaavalla

$$z_k = \frac{Z_k - Z_k^O}{Z_k^F - Z_k^O}, \quad (4.7)$$

jossa yläindeksi F tarkoittaa skalaarin arvoa polttoainevirrassa ja O arvoa happivirrassa. Uudet normalisoidut muuttujat z_k saavat arvon nolla happivirrassa ja yksi polttoainevirrassa. Kaikilla muuttujilla z_k on samat reunaehdot, jolloin $z_1 = z_2 = z_3 = z$ ja muuttuja z noudattaa siirtoyhtälöä

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i z) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i} \right). \quad (4.8)$$

Muuttujaa z kutsutaan seososuudeksi.

Edellinen osuus koskee seososuutta vain yksinkertaisessa yhden reaktion tapauksessa. Monivaiheisen reaktion tapauksessa seososuuden johto tapahtuu hieman eri tavoin. Monivaiheisessa reaktiossa eri aineet eivät säily reaktioissa, jolloin ei voida suoraan käyttää aineiden siirtoyhtälöitä seososuuden määrittelyn pohjana, mutta alkuaineet säilyvät. [22, 17]

Yleinen reaktioyhtälö reaktiolle j on

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_k \quad \text{jossa } j = 1..M, \quad (4.9)$$

jossa M on reaktioiden lukumäärä mekanismissa, N on mekanismiin osallistuvien aineiden lukumäärä, \mathcal{M}_k aineen tunnus ja ν_{kj} aineen stoikiometrinen kerroin reaktioyhtälössä. [22]

Kaikki reaktioihin osallistuvat aineet koostuvat vähintään yhdestä alkuaineesta p , jonka massaosuus Z_p on

$$Z_p = \sum_{k=1}^N a_{kp} \frac{W_p}{W_k} Y_k, \quad (4.10)$$

jossa a_{kp} on alkuaineen atomien lukumäärä aineessa k , jonka massosuuden siirtoyhtälö on

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k. \quad (4.11)$$

Kertomalla yhtälö puolittain termillä $a_{kp} W_p / W_k$ ja laskemalla kaikkien aineiden siirtoyhtälöt yhteen saadaan johdettu siirtoyhtälö alkuaineen p massaosuudelle Z_p

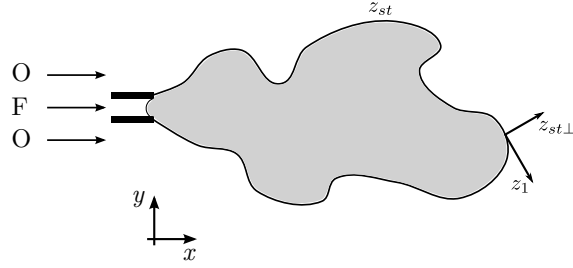
$$\frac{\partial \rho Z_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Z_p) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Z_p}{\partial x_i} \right) + S_p. \quad (4.12)$$

Nyt em. yhtälön lähdetermi on muodossa

$$S_p = \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N a_{kp} \frac{W_p}{W_k} \dot{\omega}_{kj} = 0, \quad (4.13)$$

jolloin on saatu säilymismuotoinen siirtoyhtälö alkuaineelle p .

Käyttämällä massaosuudelle Z_p normalisointiyhtälöä 4.7 saadaan johdettua alkuaineelle p uusi muuttuja z_p , jonka vaihtelu väli on 0..1 ja silloin kaikille $z_p = z$.



Kuva 4.1: Flamelet-periaate. Kuvaan merkitty karteesinen koordinaatisto, jossa virtausyhtälöt ratkaistaan sekä flamelet yhtälöiden muunnettu koordinaatisto.

4.2.2 Flamelet-oletus

Tässä mallissa turbulentin liekin ajatellaan muodostuvan pienistä laminaareista liekin paloista (flamelets). Laminaarin vastavirtaliekkin ajatellaan muodostavan hyvän yksinkertaistuksen tällaiselle laminaarille liekin palalle. Stoikiometrinen seososuus määritellään (reaktioyhtälön (4.1) mukaan)

$$z_{st} = \frac{1}{1 + \frac{n_O W_O Y_F^0}{n_F W_F Y_O^0}} \quad (4.14)$$

ja liekin pinnan ajatellaan sijaitsevan stoikiometrisella seososuuden kohdalla z -avaruudessa. [22]

Flamelet-mallissa palamisen ajatellaan tapahtuvan stoikiometrisen seososuuden z_{st} muodostamalla pinnalla. Tällä pinnalla vain pinnan normaalin suuntainen gradientti oletetaan olevan merkityksellinen. Muut gradientit ovat dimensioanalyysin perusteella pieniä, mitä kuva 4.1 havainnollistaa [17]. Polttoainevirta F tulee kuvassa keskimmäisenä ja hapetin O polttoaineen molemmilta puolilta.

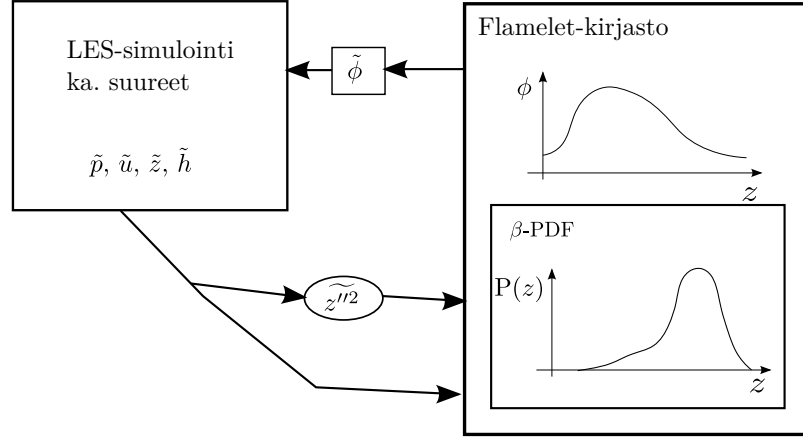
Valitaan koordinaatisto seuraavasti: Stoikiometrisen seoksen pinnan suuntainen normaalikoordinaatti z (kuvassa 4.1 merkitty $z_{st\perp}$) ja muut koordinaatit z_1 ja z_2 pinnan tangentin suuntaisiksi. Seuraavaksi suoritetaan koordinaatistomuunnos aine- ja energiayhtälöille kaavoilla

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial z}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial z} \quad (4.15)$$

$$\nabla \rightarrow \nabla_z \frac{\partial}{\partial z} + \nabla_{z\perp}, \text{ jossa } \nabla_{z\perp} = \left(0, \frac{\partial}{\partial z_1}, \frac{\partial}{\partial z_2}\right) \quad (4.16)$$

jolloin kaavasta 2.5 sijoituksen jälkeen saadaan [21]

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \rho \frac{Q}{c_p} \dot{\omega}_k = 0 \quad (4.17)$$



Kuva 4.2: Ennaltalasketun Flamelet kirjaston kytkentä virtauslaskentaan.

Em. kaavassa esiintyvä χ on skalaarin dissipaatio ja se on määritelty

$$\chi = 2\mathcal{D} \frac{\partial^2 z}{\partial x_i^2}. \quad (4.18)$$

Skalaarin dissipaation kautta vallitseva virtaustilanne välittyy flamelet-yhtälöön ja kemiallinen kinetiikka on yhdistetty seososuusavaruuden kautta virtauslaskentaan (ks. kuva 4.2) [22]. Kaikille muillekin suureille saadaan johdettua samantyyppinen yhtälö kuin yhtälö (4.17).

Yhtälöstä (4.17) nähdään, että kaikkien aineiden massaosuudet ja energia ovat vain seososuuden ja skalaarin dissipaation funktioita, jolloin muuttujat ϕ esittää yleisesti

$$\phi = \phi(z, \chi) \quad (4.19)$$

Nyt kaikki seoksen koostumuksesta ja lämpötilasta riippuvat suureet ovat seososuuden funktioita. Yleisimpiä tällaisia suureita ovat viskositeetti, tiheys, ominaislämpökapasiteetti tai moolimassa

$$\mu = \mu(z, \chi), \quad \rho = \rho(z, \chi), \quad c_p = c_p(z, \chi), \quad W = W(z, \chi). \quad (4.20)$$

Jos χ voidaan parametrizoida myös seososuuden funktioksi, niin koko flamelet kirjasto voidaan laskea etukäteen erillään virtauslaskennasta. Tämä on flamelet mallien suurin etu verrattuna erilaisiin sekoitusmalleihin verrattuna. Simulointi saadaan jaettua kahdeksi erilliseksi ongelmaksi: Flamelet yhtälöiden kemiaan ja virtauksen määrittämään sekoitukseen. Tällöin mielivaltaisen monimutkaisenkaan kemiallisen mekanismin käyttäminen ei kasvata virtaussimuloinnissa ratkaistavien suureiden lukumäärää ja näin kasvata laskennan monimutkaisuutta ja aikaa.

χ ja seososuus voidaan yhdistää esimerkiksi

$$\chi(z) = \chi_{\text{st}} \frac{f(z)}{f(z_{\text{st}})}, \quad (4.21)$$

jossa alaindeksillä ”st” on merkitty seososuuden ja skalaarin dissipaation arvoja seoksen stoikiometrisellä seoksella. Yleisimmin funktioksi f valitaan virhefunktion komplementti [17].

Ratkaisemalla muuttujille Y_i ja T yhtälöstä (4.17) muodostuva differentiaaliyhtälöryhmä saadaan kaikkien aineiden massaosuus ja lämpötila seososuuden ja skalaarin dissipaation funktiona ratkaistua. Ratkaisuun käytetään useimmiten tarkoitukseen erikseen kirjoitettua tietokoneohjelmaa. Yksi tällainen ohjelma on Pitschin kehittämä FlameMaster-koodi [19]. Tulokset taulukoidaan virtauslaskennassa käytettäväksi.

Virtaussimuloinnin tuloksena saadaan ratkaistavien suureiden keskiarvotetut ratkaisut. Koska kaikki palamisen ratkaisevasti vaikuttavat pituusskaalat ovat huomattavasti pienempiä kuin laskentahilan koko, eli ratkaistavien suureiden suuruusluokka, niin keskiarvoista pitää päästä flamelet-yhtälöiden ratkaisuna saatuihin tarkkoihin suureisiin. Flamelet-yhtälöiden ratkaisuna saadaan suureiden muutokset tarkasti seososuuden ja muiden parametrisoivien muuttujien suhteen. Virtaussimuloinnin keskiarvosuureet ja Flamelet-ratkaisun tarkat suureet pitää pystyä yhdistämään, jotta flamelet-yhtälöiden ratkaisua voidaan hyödyntää simuloinnissa.

Yhtälöistä (4.17) ratkaistu flamelet-kirjaston arvot ovat tarkkoja hetkellisiä suureiden arvoja. Virtauslaskennassa on kuitenkin käytettävissä vain parametrien keskiarvotettuja tai suodatettuja arvoja. Tällöin pitää jollain tavalla mallintaa hetkelliset arvot keskiarvoiksi. Useimmiten käytetään oletetun muotoista todennäköisyysfunktiota, joiden oletetaan noudattavan β -funktion muotoa. β -funktio on suhteellisen yksinkertainen funktio, joka määritellään kaavalla

$$p(z) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} z^{a-1} (1-z)^{b-1}, \quad (4.22)$$

jossa Γ on gamma-funktio. a ja b ovat seososuuden keskiarvon \tilde{z} ja seososuuden varianssin keskiarvon $\widetilde{z'^2}$ funktioita ja ne määritellään kaavoilla

$$a = \tilde{z} \left[\frac{\tilde{z}(1-\tilde{z})}{\widetilde{z'^2}} - 1 \right], \quad b = \frac{a}{\tilde{z}} - a. \quad (4.23)$$

Suureen keskiarvo saadaan näin lausekkeesta

$$\widetilde{Y}_i = \int_0^1 Y_i(z) p(z) dz. \quad (4.24)$$

Kaavan (4.24) numeerinen integrointi on kuitenkin hankalaa, koska β -funktio saa seososuuden ja varianssin arvoista riippuen nollasta kahteen singulariteettia tai Γ -funktion laskennassa törmätään ylivuotoon. [9]

RANS laskennassa useimmiten varianssille $\widetilde{z''^2}$ ratkaistaan oma siirtoyhtälö, kun LES laskennassa puolestaan käytetään kaavaa [20]

$$\widetilde{z''^2} = C_v \Delta^2 (\nabla \widetilde{z})^2 . \quad (4.25)$$

Kaavassa Δ on laskentakopin pituusskaala. Vakion C_v arvo voidaan myös mallintaa käyttäen dynaamisia menetelmiä. [18, 14]

Flamelet-mallilla saadaan palamisen simulointi jaettua kahdeksi erilliseksi osaongelmaksi eli virtaussimuloinnissa ratkaistavaksi sekoitusongelmaksi ja kemian taulukoinnissa ratkaistavaksi kemiaongelmaksi.

4.2.3 Ei-adiabaattinen flamelet-malli

Kappaleessa 4.2.1 johdetulla tavalla määritelty seososuus kuvaa aina adiabaattista tapausta. Ei-adiabaattisessa tapauksessa voidaan näitä ilmiöitä huomioida muokkaamalla flamelet-mallia. Yleisiä ilmiöitä, joita ei voida huomioida normaaleilla flamelet-malleilla ovat säteily sekä lämpövirta tai vakio lämpötila tulipesän seinillä. Edellä mainitut ilmiöt ovat hyvin tärkeitä todellisissa polttolaitteissa.

Brayn ja Petersin [2] mukaan erot voidaan huomioida ratkaisemalla energialle oma yhtälö ja ottamalla entalpiaeron flamelet-kirjaston yhdeksi parametriksi. Kun entalpialle on virtausratkaisussa oma siirtoyhtälö on siihen helppo kytkeä säteilyn ja seinämien ei-adiabaattiset ilmiöt. Säteily lisätään siirtoyhtälöön lähdetermin kautta ja seinämällä oleva lämpövirta tai vakiolämpötila siirtoyhtälön reunaehdoissa.

Entalpiaero määritellään

$$\Delta h = \tilde{h} - \tilde{h}_{\text{ad}} , \quad (4.26)$$

jossa \tilde{h} on energian siirtoyhtälöstä ratkaistu entalpia ja \tilde{h}_{ad} flamelet-kirjaston adiabaattinen entalpia. [2]

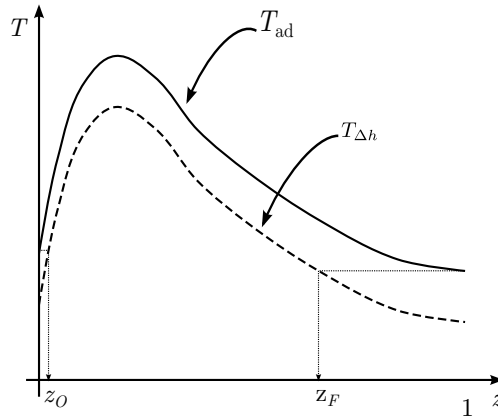
Flamelet-kirjastoon tulee näin uusi muuttuja parametriksi, jolloin keskiarvosuureeksi saadaan

$$\tilde{\phi} = \tilde{\phi}(\tilde{z}, \widetilde{z''^2}, \chi, \Delta h) \quad (4.27)$$

Kuinka entalpiaero otetaan huomioon ei-adiabaattisen flamelet-kirjaston laskennassa? Pohjana käytetään adiabaattisen tilanteeseen laskettua flamelet-kirjastoa. Entalpiaeron Δh arvolla muokataan adiabaattista lämpötilaprofiilia kaavalla

$$\Delta T(z) = \frac{\Delta h}{C_p(z)} \quad (4.28)$$

jossa C_p on seososuuden funktiona annettu seoksen ominaislämpökapasiteetti. Lämpötilaeron ΔT avulla saadaan laskettua lämpötilaprofiili entalpiaerolla Δh . Uudella



Kuva 4.3: Ei-adiabaattisen flamelet-kirjaston reunaehtojen määrittäminen.

lämpötilaprofililla kuitenkin hapettimen ja polttoaineen virroissa lämpötila laskee alle reunaehtojen arvon. Hapettimelle ja polttoaineelle ratkaistaan muokatusta lämpötilaprofilista seosuuden arvo, jolla virran lämpötila on oikea (kuva 4.3). Näin saadaan ratkaistua uudet reunaehdot z_O ja z_F , joiden perusteella ratkaistaan seoksen koostumus. Käyttämällä tätä uutta koostumusta reunaehtona saadaan ratkaistua yhtälön (4.17) mukaisesti uusi ei-adiabaattinen flamelet-kirjasto entalpiaerolla Δh .

Kokonainen ei-adiabaattinen flamelet-kirjasto saadaan laskemalla edellä esitellyllä tavalla käyttäen useita eri entalpiaeron arvoja. Entalpiaeroa ei tarvitse laskea kuin muutamilla kymmenillä eri arvoilla, jotta saadaan muodostettua edustava kirjasto. [26, 27]

Ei-adiabaattisessa flamelet-kirjastossa seososuusavaruus on leikkaantunut pienemmäksi kuin teoriassa se olisi. Pienillä entalpiaeron arvoilla seososuusavaruuden leikkautumisella ei ole merkitystä, mutta käytettäessä isoja entalpiaeron arvoja sillä voi olla merkitystä. Ravikanti [26] on tarkastellut asiaa ja havainnut leikkautumisella olevan häviävän pieni merkitys keskiarvosuureiden arvoihin. [26, 27]

4.2.4 Edistymismuuttuja/Flamelet -malli

Edistymismuuttujan ottaminen käyttöön Flamelet-mallissa saadaan huomiotua eri aineiden monikomponenttidiffuusio käyttämällä mahdollisimman pientä määrää siirtoyhtälöitä. Monikomponenttidiffuusion tuottamien ilmiöiden lisäksi mallilla voidaan simuloida liekin irtoamista sekä uudelleen syttymistä. [27, 18]

Käytettäessä pelkkää seososuutta ei ole käytettävissä mitään olennaista tietoa reaktioista virtaussimuloinnissa. Malli ei pysty myöskään huomioimaan muutoksia olosuhteissa seososuuden gradientin kohtisuorissa suunnissa. Perus flamelet-mallissa kaikki skalaarimuuttujat riippuvat säilyvästä seososuudesta. Tällöin uusi käyttöön otettava muuttuja ei saa olla säilyvä, koska silloin se olisi yksikäsitteisesti seososuuden avulla lausuttavissa [18]. Edistymismuuttujalla kirjoitetaan siirtoyhtälö edellä

mainituin periaattein, jolloin saadaan

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \alpha_C \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{\omega}_C. \quad (4.29)$$

Yhtälössä ω_C on lähdetermi ja α_C edistymismuuttujan diffusiviteetti.

Miten edistymismuuttuja sitten määritellään? Muuttujan pitäisi sisältää jokin tärkeä, ja prosessin tilaa kuvaava suure ja sillä pitää saavuttaa yksikäsitteinen yhteys kaikkien eri kemiallisten tilojen välille. Paras tällainen suure olisi entropia, mutta sen toteuttaminen käytännön laskennoissa olisi vaikeaa, koska entropiaa säätelee huomattavasti monimutkaisemmat mekanismit kuin yhtälön (4.29) edistymismuuttujaa. Entropian yhtälöön tulisi lähdetermejä johtuen sekoittumisesta sekä kemiallisista reaktiosta. Pierce [18] määritteli edistymismuuttujan palamistuotteiden summana, jolloin

$$C = Y_{\text{H}_2\text{O}} + Y_{\text{CO}_2}. \quad (4.30)$$

Yhtälö (4.29) on hetkellinen tarkka yhtälö. LES-laskennassa käytettävä keskiarvoitettu yhtälö saadaan samanlaisella menettelyllä kuin kappaleessa 3.2 on tehty. Nyt edistymismuuttujan siirtoyhtälön (4.29) lähdetermi $\dot{\omega}_C$ on edistymismuuttujan määrittelyssä käytettyjen aineiden tuottonopeuksien summa. Nämä tuottonopeudet saadaan ratkaistua Flamelet-kirjastosta. [27]

4.3 Eddy Dissipation Concept

Eddy Dissipation Concept (EDC) on yleinen reaktorikonsepti, jossa reaktioiden ajatellaan tapahtuvan turbulenssin pienimmissä skaaloissa. Mallista on olemassa eri versioita, joista tässä esitellään uudempaa mallia [10, 11]. EDC-mallissa reaktioiden oletetaan tapahtuvan turbulenssin pienissä rakenteissa ns. hienorakenteissa. Hienorakenteissa tapahtuvat reaktiot mallinnetaan käyttäen vakioaineista täydellisesti sekoittunutta reaktoria, jossa reaktionopeutta säätelee puhtaasti kemiallinen kinetiikka.

EDC-mallin suurten pyörteiden simulointiin sovitetussa versiossa [16] hienorakenteen massaosuutta kuvataan yhtälöllä

$$\gamma_\lambda = C_{\text{EDC}} \left(\frac{\nu}{\nu_{sgs}} \right)^{1/4}, \quad (4.31)$$

jossa ν , ν_{sgs} ja C_{EDC} ovat kinemaattinen molekyyläarinen viskositeetti, alihilan viskositeetti ja mallivakio vastaavasti. Suoraan teoriasta määritetty C_{EDC} :n arvo on 1,01, joka yliarvioi liekin lämpötilan ja aliarvioi liekinpituuden. Panjwani havaitsi arvon 0,25 vastaavan hyvin mittaustuloksia. Vielä parempaan tulokseen päästäisiin

laskemalla vakion arvo dynaamisesti siten, että se riippuisi virtaustilanteesta. Myös termin γ_λ arvo on rajoitettu pienemmäksi kuin yksi. [16]

Hienorakennereaktorin viipymäaika saadaan yhtälöstä [10]

$$\tau^* = 0.41 \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2}. \quad (4.32)$$

Panjwani [16] määrittelee aineen k keskiarvoreaktionopeuden lausekkeella

$$\bar{\omega}_k = \frac{\gamma_\lambda^2 \chi}{\tau^*} (Y_k^0 - Y_k^*) , \quad (4.33)$$

jossa Y_i^0 on aineen i massaosuus ympäristössä ja Y_k^* aineen k massaosuus hienorakenteessa. Kerroin χ kuvaa hienorakenteen reagoivan osuuden suuruutta.

Hienorakenne reaktorin mallintamiselle on muutamia erilaisia vaihtoehtoja. Reaktorin voidaan olettaa olevan jatkuvuustilassa tai reaktorin voidaan antaa reagoida yli ajan τ^* .

Täydellisesti sekoittunutta reaktoria kuvataan yhtälöryhmällä

$$\rho^* \frac{dY_k^*}{dt} = \bar{\omega}_k + \frac{\rho^*}{\tau^*} (Y_k^o - Y_k^*) . \quad (4.34)$$

Oikean puolen ensimmäinen termi $\bar{\omega}_k$ on kemiallisen kinetiikan määrittämä reaktionopeus (Arrhenius nopeus) ja toinen termi kuvaa hienorakenteen ja ympäristön välistä massansiirtoa, jossa y_i^o on aineen i massaosuus ympäristössä, joka voidaan ratkaista kaavasta

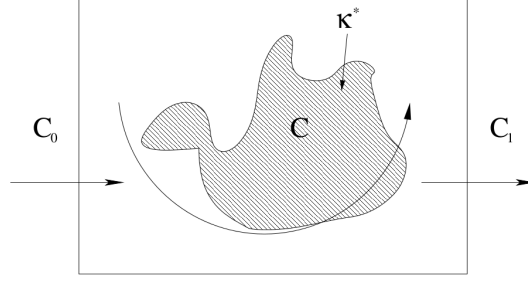
$$\bar{Y}_k = \gamma^* \chi Y_k^* + (1 - \gamma^* \chi) Y_k^o . \quad (4.35)$$

Nyt saadaan ympäristön massaosuus sidottua siirtoyhtälön ratkaisuna saatavaan aineen i keskiarvoon.

Käytettäessä monimutkaisia kemiallisia mekanismeja yhtälöryhmä (4.34) muodostuu hyvin jäykäksi ja tämän myötä vaikeaksi sekä hitaaksi ratkaista. Kemian ratkaisun nopeuttamiseen on esitetty muutamia menetelmiä. Tunnetuin näistä on ISAT-menetelmä (In Situ Adaptive Tabulation). [23]

Usein laskennassa tarvittava eri kemiallisten koostumuksien määrä on hyvin rajallinen koko mahdolliseen koostumusavaruuteen verrattuna. Tämän vuoksi on mahdollista nopeuttaa laskentaa laskemalla vain tarvittaessa kemiallisen reaktiokinetiikan yhtälöt ja taulukoimalla tulokset käytettäväksi laskennan jatkuessa. Pope on esittänyt menetelmän, jolla kemiallisen kinetiikan ratkaisu ja taulukointi suoritetaan laskennan aikana.

Menetelmä toimii myös tilanteissa, joissa käytetään hyvin moniulotteisia kemian taulukointeja, josta esimerkkinä flamelet-menetelmien taulukointi. Taulukoiden haku ja moniulotteinen interpolointi voi muodostua laskenta-ajan kannalta kannattamattomaksi.



Kuva 4.4: Periaatekuva Osittain sekoittuneen reaktorin -mallista. [15]

4.4 Osittain sekoittuneen reaktorin -malli

Chalmerssin yliopistossa kehitetyssä osittain sekoittuneen reaktorin -mallissa (PaSR, Partially Stirred Reactor) laskentakoppi jaetaan kahteen osaan, reagoivaan osaan ja reagoimattomaan osaan. Reagoivaa osaa mallinnetaan täydellisesti sekoittuneena reaktorina (PSR). Koko laskentakopin oletaminen täydellisesti sekoittuneeksi olisi huomattava yliarviointi, koska todelliset liekit ovat paljon ohuempia kuin laskentakopin koko. Reaktioiden tapahduttua sekoittuvat reagoanut ja reagoimaton osuus kopista ajassa t_k turbulenssista johtuen. Tästä saadaan reagoineen kopin keskimääräinen pitoisuus. [15, 6]

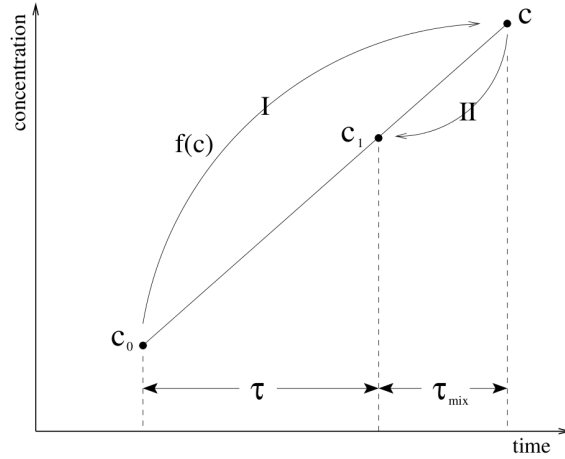
PaSR-mallin mukaan laskentakopissa reaktioiden jälkeen aineen i konsentraatio on

$$c_i^1 = \kappa^* c_i + (1 - \kappa^*) c_i^0, \quad (4.36)$$

jossa κ^* , c_i^1 ja c_i^0 ovat kopissa reagoivan seoksen massaosuus, konsentraatio reaktioiden ja sekoittumisen jälkeen sekä konsentraatio ennen reaktioita (kuva 4.4). Mallissa on kolme erikseen käsiteltävää pitoisuutta. Kopista poistuva pitoisuus c^1 saadaan lineaarisena interpolaationa pitoisuuksista c_i ja c_i^0 , kuten kaavasta (4.36) nähdään. Tämä mekanismi on esitetty kuvassa 4.5 graafisesti. Kuvasta nähdään, että pitoisuuksien c_i^1 ja c_i^0 välinen aika on τ , jonka pitää olla sama kuin simuloinnin aika-askeleen, koska pitoisuutta c_i^1 käytetään alkuarvauksena seuraavalla aika-askeleella. Aika, jonka kuluessa aineet sekoittuvat on τ_{mix} .

Oletettaessa, että kuvassa 4.5 käyrän kulmakerroin on reaktionopeus nähdään, että

$$\frac{c_i^1 - c_i^0}{\tau} = \frac{c_i - c_i^1}{\tau_{\text{mix}}} = f(c_i), \quad (4.37)$$



Kuva 4.5: PaSR-mallin reaktio- ja sekoittumisen aikaskaalojen muodostuminen. [15]

jossa $f(c_i)$ on aineen i reaktionopeus aika-askeleella τ . Reaktionopeutta voidaan aproksimoida Taylorin kaavalla

$$f(c_i) = f(c_i^1) + \frac{\partial f}{\partial c}(c_i - c_i^1), \quad (4.38)$$

jossa reaktionopeuden gradientti arvioidaan käyttäen kemian aikaskaalan käänteisarvoa

$$\frac{\partial f}{\partial c} = -\frac{1}{\tau_c}. \quad (4.39)$$

Sijoittamalla kaavaan (4.38) edellinen yhtälö saadaan

$$f(c_i) = f(c_i^1) - \frac{c_i - c_i^1}{\tau_c} \quad (4.40)$$

Seuraavaksi sijoittamalla edellisen tuloksen kaavaan (4.37) ja käyttämällä (4.36) saadaan tuntematon pitoisuus c_i supistettua yhtälöistä ja reaktionopeudelle saadaan

$$\frac{c_i^1 - c_i^0}{\tau} = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{\text{mix}}} f(c_i^1), \quad (4.41)$$

josta reagoivaksi osuudeksi saadaan

$$\kappa_i = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{\text{mix}}}. \quad (4.42)$$

Sekoitusajalle τ_{mix} on kirjallisuudessa monia erilaisia vaihtoehtoja. D'Errcio [3] käyttää Taylorin ja Kolmogorovin aikojen geometrasta keskiarvoa

$$\tau_{\text{mix}} = C_{\text{mix}} \sqrt{\tau_t \tau_k} \quad (4.43)$$

ja Nordin käyttää pelkästään Taylorin aikaskaalaan liittyvää määrittelyä

$$\tau_{mix} = C_{mix} \frac{k}{\epsilon}. \quad (4.44)$$

Vakiolle C_{mix} on usein esitetty arvo 0,005, jota on käytetty simuloitaessa palamista dieselmoottorissa [3, 15]. Kuitenkin vakion arvo voi vaihdella välillä 0,001–0,3 [15], virtauksesta riippuen.

PaSR-mallissa aineyhtälöiden 3.14 lähdetermi $\bar{\omega}_k$ saadaan kaavasta

$$\bar{\omega}_k = \kappa \dot{\omega}_k, \quad (4.45)$$

jossa $\dot{\omega}_k$ on laminaari reaktionopeus, joka on kinetiikan määräämä, ja κ on turbulenttia sekoittumista kuvaava termi. ja $C_{mix} = 0,1$. t_c kemiallinen aikaskaala, on reaktiosysteemin ratkaisun yhteydessä saatu systeemin karakteristinen aika [6].

Reaktionopeuden $\dot{\omega}_i$ ratkaisu saadaan samantyyppisestä reaktiosysteemistä kuin EDC-mallin tapauksessa. Laskennan nopeuttamiseksi käytettävä ISAT-menetelmä toimii samoin myös PaSR-mallissa.

5 MALLINNETTUJA POLTTOLAITTEITA

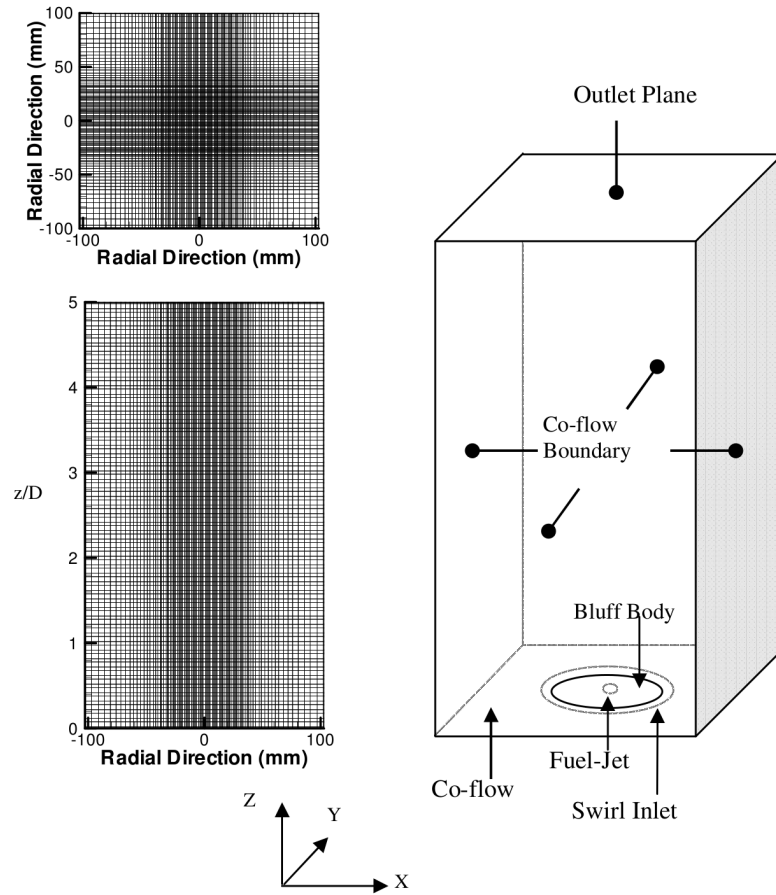
5.1 Sadasivunin Flamelet-mallien vertailu

Sadasivuni [27] käytti eri versioita Flamelet-malleista tutkiakseen erilaisia laboratorioliekkejä. Mallinnuksessa Sadasivuni käytti stationääriä flamelet-mallia sekä ei-adiabaattista flamelet-mallia. Ei-adiabaattisista ilmiöistä huomioitiin säteily, jonka mallintamiseen käytettiin Discrete Transfer -mallia (DTM).

Laskentaverkko on rakenteellinen heksaverkko, joka koostuu miljoonasta laskentakopista. Kuvassa 5.1 on esitetty vasemmalla kaksi kuvaa laskentaverkosta. Verkkoa on tihennetty polttimen ja erityisesti polttoainesuihkun läheisyydessä. Liekki on pyörrestabiloitu, jolloin ilma tulee voimakkaasti pyörien laskentageometriaan. Tämän vuoksi pitää verkon olla tiheä lähellä polttoaineen syöttökohtaa. Oikealla kuvassa 5.1 on periaatekuva laskentageometriasta. Haittalevyn (Bluff Body, kuva 5.1) keskellä on polttoainesuihku ja sen reunoilta tulee palamisilma voimakkaalla pyörteellä, jolla stabiloidaan liekki.

Sadasivuni laski useita erilaisia tapauksia, joita vertailtiin. Kuvassa 5.2 on liekin lämpötilajakauma esitettynä symmetriatasolta. Kuvassa (a) laskenta on suoritettu käyttäen stationääriä flamelet-mallia ja kuvassa (b) ei-adiabaattisella mallilla säteilyhuomioiden. Tärkein kuvasta havaittava asia on se, että liekki diffundoituu säteen suuntaan huomattavasti voimakkaammin tapauksessa, jossa säteily on huomioitu. Tämä voidaan kuvasta (b) havaita liekin ympärille muodostuneista alemman lämpötilan alueista. Leviäminen johtuu siitä, että voimakkaasti säteilevät palamistuotteet, lähinnä CO_2 ja H_2O säteilevät voimakkaasti ympäristöön. [27]

Lämpötilaprofilin kehittyminen säteen suunnassa eri kohdissa liekkiä on kuvassa 5.3, jossa on esitetty laskentatulokset, jotka on laskettu käyttäen stationääriä flamelet-mallia (pistekatkoviiva) ja ei-adiabaattisella mallilla. Ei-adiabaattisesta mallista on käytetty kolmea erilaista versiota, jotka eroavat säteilymallin tarkkuuden osalta. Säteilymallina on käytetty DTM-menetelmää, jossa on varioitu lasketta-

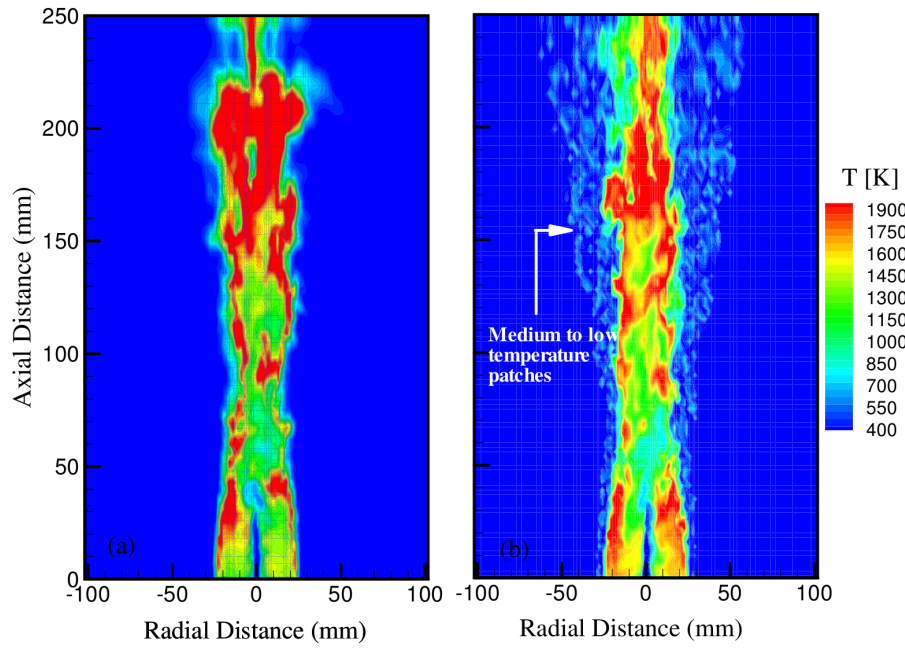


Kuva 5.1: Sadasivunin [27] käyttämä laskentaverkko sekä yleiskuva mallinnetusta geometriasta. [27]

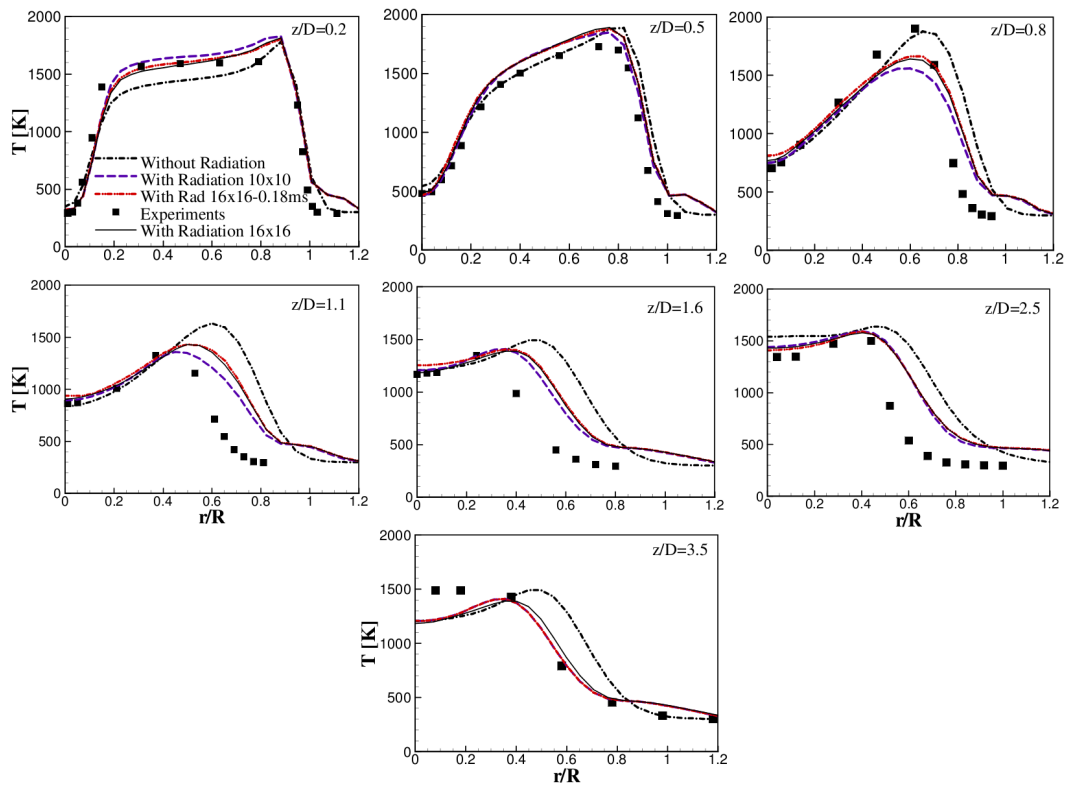
vien säteiden määrää sekä säteilyn päivitystiheyttä verrattuna virtaussimuloinnin iteraatioihin. Kuvasta havaitaan ei-adiabaattisen mallin ennustavan lähes kaikissa tapauksissa lämpötilan paremmin kuin adiabaattinen malli. Adiabaattinen malli yliarvioi lämpötilaa kaikkialla, kun taas säteilyhäviöt huomioiva ei-adiabaattinen malli ennustaa lähemmäksi kokeellisia arvoja. Säteilyn vaikutus on hyvin pieni liekin keskiakselilla korkeuteen $z/D = 2,5$ asti. [27]

5.2 Panjwanin EDC-malli

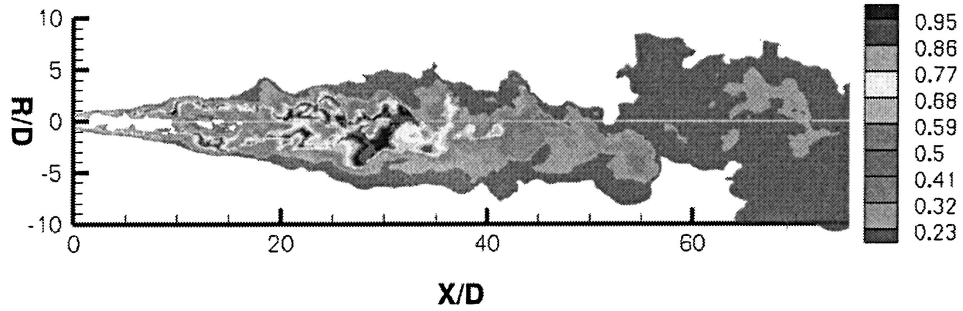
Suurten pyörteiden simulointia ja EDC-mallia käyttäen Panjwani simuloi Flame H3-laboratorioliekkiä, josta on TU Darmstadtissa tehty mittaukset. Polttoaineena käytettiin vedyn ja typen seosta, joita oli yhtä paljon. Polttoainevirran nopeus oli 34,8 m/s. Ilmavirran, johon polttoaine suihkutettiin, nopeus oli 0,2 m/s. Laskentahilassa oli tasaisesti jakautuneena 940 000 laskentakoppia. Sisäänvirtauksessa käytettiin keskimääräistä nopeusprofiilia, johon lisättiin heilahtelukomponentteja. Ulosvirtauksessa



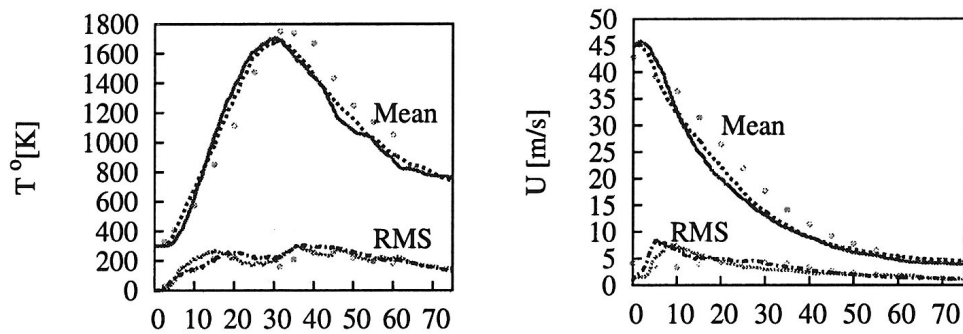
Kuva 5.2: Hetkellinen lämpötilajakauma symmetriatasolta (a) ilman säteilyä ja (b) säteilyn kanssa. [27]



Kuva 5.3: Säteen suuntaiset lämpötilaprofiilit eri pituusakselin kohdista liekkiä. [27]



Kuva 5.4: Hienorakenteen reagoivan osuuden χ hetkellinen tila. [16]

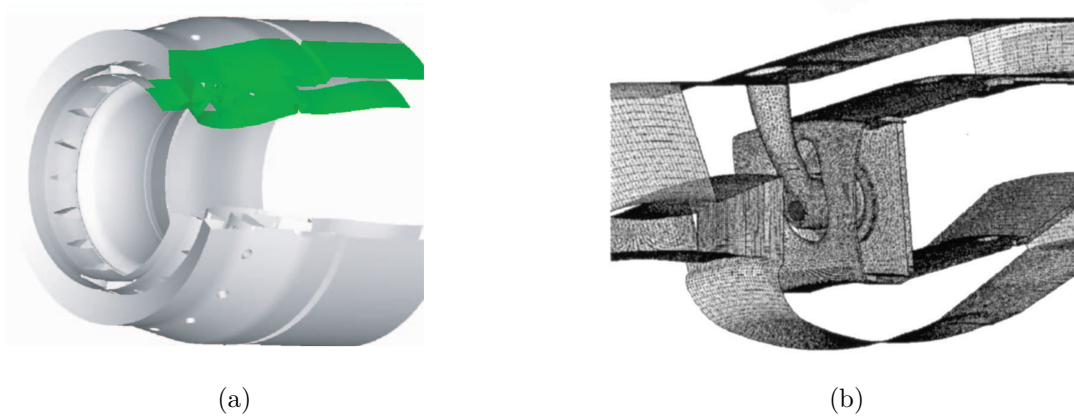


Kuva 5.5: Lämpötilan ja nopeuden keskiarvo- ja heilahteluprofiilit keskiakselilta. [16]

ja laskenta-alueen reunoilla oletettiin nollagradietti. [16]

Kuvassa 5.4 on esitetty Panjwanin [16] mallintaman liekin hienorakenteen reagoivan osuuden χ suuruus. Kuvasta nähdään, että pääreaktioalue (25 D–40 D) on hyvin edustettuna reagoivan massaosuuden mukaan. Hienorakenteen reagoivan massaosuuden käsite on huomattavan saman tyylinen kuin Flamelet/edistymismuuttuja-mallin edistymismuuttujan käsite [16]. χ ja edistymismuuttuja molemmat mallintavat reaktioiden suuruutta tai vaihetta reaktiossa. Samoin seososuus ja hienorakenteen massaosuus mallintavat sitä kuinka paljon polttoainetta ja hapetinta on sekoittuneena ja valmiina reagoimaan. [16]

Lämpötilan ja nopeuden keskiarvo ja heilahtelukomponentin profiilit liekin keskiakselilla on esitetty kuvassa 5.5. Kuvassa EDC-mallilla laskettuja tuloksia on verrattu Flamelet-malliin sekä kokeellisiin tuloksiin. EDC-mallin mukainen liekin pituus on Panjwanin mukaan hyvin ennustettu. Myöskin laskentatulokset vertautuvat hyvin mitattuihin arvoihin. [16]



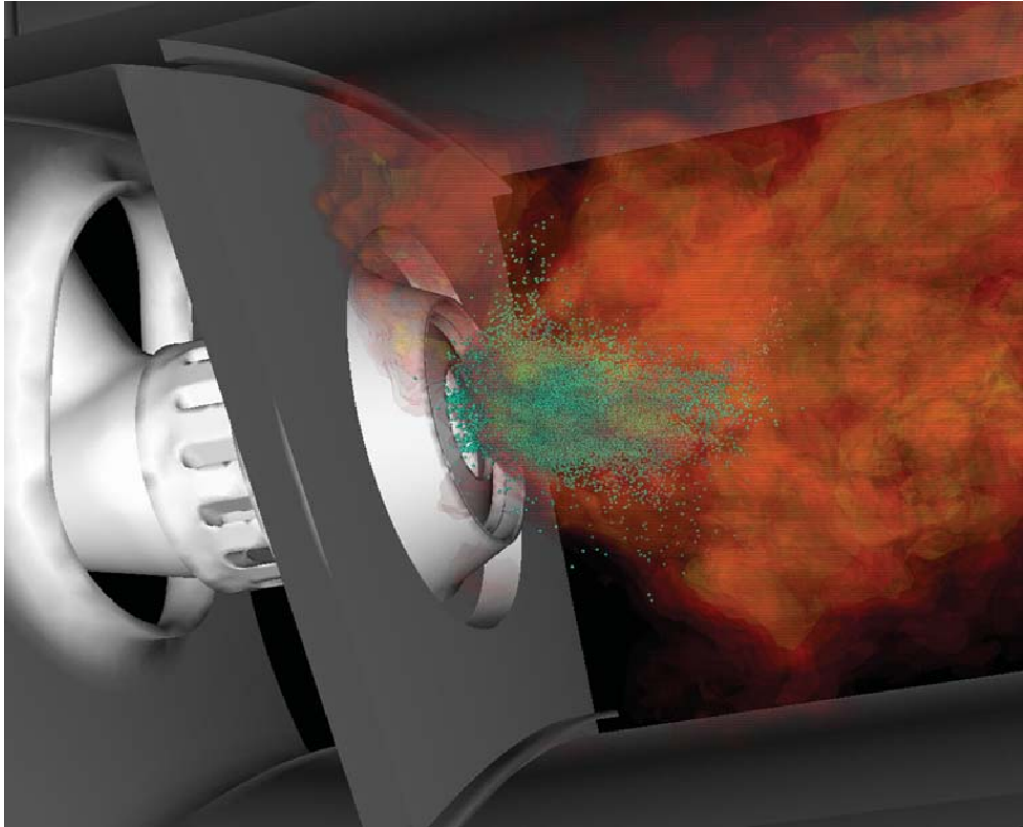
Kuva 5.6: Mallinnettu kaasuturbiinin polttokammio. (a) Koko polttimen geometria. Vihreällä värillä merkitty yhden polttimen osuus joka on samalla mallinnettu osuus. (b) Lähikuva polttimen geometriasta. Ilma tulee kuvaan vasemmasta reunasta ja varsinainen poltin näkyy kuvassa keskellä. [12]

5.3 Kaasuturbiinin polttokammio

Mahes *et. al.* [12] sekä Moin ja Apte [14] ovat mallintaneet Pratt & Whitneyyn kaasuturbiinin polttokammiota. Polttokammion mallissa tarkastellaan yhtä poltinta. Laskentageometria käsittää symmetrisen osan yhdestä turbiinin polttimesta. Kyseisessä kaasuturbiinissa on yhteensä kahdeksantoista poltinta. Oikean kaasuturbiinin poltin on hyvin monimutkainen kokonaisuus. Ilma kulkee useiden sisäkkäisten väliseinien ja reikien läpi virratessaan polttokammioon. Itse polttimessa ilma laitetaan voimakkaasti pyörimään, jolloin kammion keskelle saadaan muodostumaan voimakas takaisinvirtauspyörre. Pyörteen ansiosta kuumat savukaasut sekoittuvat tehokkaasti kylmiin polttoaine- ja ilmavirtoihin ja takaavat tasaisen ja tehokkaan palamisen. [12]

Palamismallina käytettiin Flamelet/edistymismuuttuja-mallia (kappale 4.2.4). Mallia on muokattu huomioimaan nestemäisten pisaroiden höyrystyminen. Flamelet-kirjastoa laskettaessa on käytetty tehollista kaasun lämpötilaa, jossa huomioidaan nestemäisen polttoaineen höyrystymisen vaikutus kaasun lämpötilaan. Muilta osin mallin on adiabaattinen, eikä se huomioi lämpövirtoja seinämällä. Mallissa on myös oletettu normaalin Flamelet-mallin tapaan Lewisin luvuksi yksi, jolloin terminen ja molekyylärisen diffusiviteetti ovat yhtä suuria. Alihilamallina Moin ja Apte [14] käyttivät dynaamista Smagorinskyn mallia, jossa pyörreviskositeetti, pyörrediffusiviteetti sekä seososuuden varianssin mallintamisessa käytettävät vakiot määritetään dynaamisesti virtaustilasta riippuen. [14]

Ennen varsinaisen polttimen mallinnusta Moin ja Apte [14] tarkastelivat yksitellen kaikkia simulaatioon liittyviä alimalleja ja niiden suoriutumista yksinkertaisempien



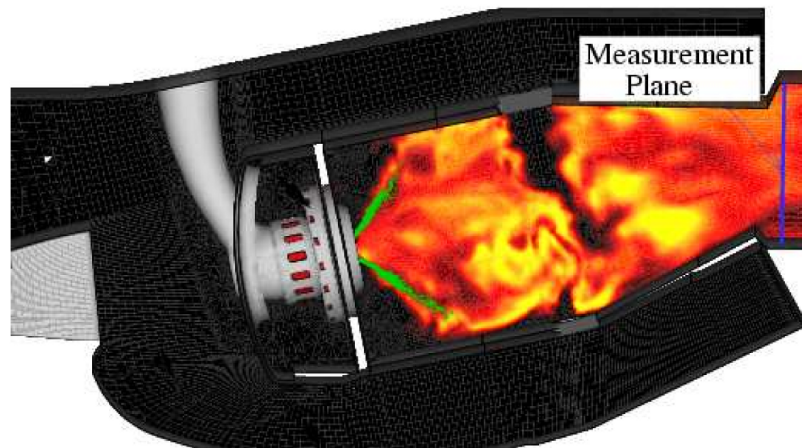
Kuva 5.7: Yleiskuva Mahes *et. al* [12] mallintamasta Pratt & Whitney kaasuturbiini polttimesta. Keskellä sinivihreällä värillä näkyvät nestemäiset polttoainepisarat ja oranssilla värillä on kuvattu liekkiä. [20]

tapausten simulointiin. Erikseen tutkitut tapaukset olivat pisaroiden liike, hajoaminen, haihtuminen sekä turbulentti palaminen. Mallinnettaessa ensin yksinkertaisempia tapauksia voitiin saada vertailukelpoisia tuloksia tapauksista, joihin on tarkat ja hyvin määritellyt reunaehdot ja vertailukelpoisia mittaustuloksia. [14]

Simulaatiossa käytetty laskentaverkko oli rakenteeton ja koostui 1,9 miljoonasta laskentakopista. Verkkoa oli tiheennetty polttoaineen syöttökohdan läheisyydessä. Verkko koostui pääasiassa heksakopeista, jotta saavutettaisiin hyvä numeerinen tarkkuus. [14]

Oikeassa turbiinin polttimessa käytetään Jet-A -polttoainetta, joka simulaatiossa mallinnettiin koostuvan 80 % n-Dekaanista ja 20 % 1-2-4 trimetyylibentseenistä. Flamelet-kirjaston laskennassa käytettiin laajaa kemiallista mekanismia, joka sisälsi yli 1000 reaktiota ja 100 ainetta. Edistymismuuttuja määriteltiin hiilidioksidin ja veden massaosuusien summana. [14]

Simulointituloksia verrattaessa kokeellisiin tuloksiin ulosvirtauksessa aineiden massaosuusien havaittiin eroavan 5 % kokeellisista tuloksista. Ulosvirtauksen lämpötila laskee havaittavasti savukaasujen sekaan johdettavan laimennusilman takia. Lämpötilat mittaustasolla eroavat alle 2 % mitatuista arvoista. Artikkelissa ei ole



Kuva 5.8: Mallinnetun turbiinin lämpötilajakauma. Kuvaan on merkitty vihreällä värillä polttoainepisaroiden sijainti. Sinisellä värillä kuvan oikeaan reunaan on merkitty mittaustason sijainti, josta kokeelliset arvot on mitattu.

eritelty tarkkoja mittaus- ja simulointituloksien arvoja, koska tarkat arvot ovat Pratt & Whitneyn omaisuutta. Kuitenkin ensimmäinen yritys mallintaa todennukainen kaasuturbiinin poltin antaa huomattavasti uutta näkemystä polttimeen palamisilmiöihin.

6 YHTEENVETO

Tietokoneiden tehon jatkuvasti kasvaessa suurten pyörteiden simulointi on koko ajan lähempänä tullakseen jokapäiväiseksi mallinnusmenetelmäksi virtauslaskentaan ja palamisen mallinnukseen. Suurten pyörteiden simuloinnilla päästään tutkimaan paremmin virtauksen epästationäärejä ilmiöitä ja sen avulla voidaan turbulენტtia sekoittumista määrittää tarkemmin kuin vanhoilla perinteisillä menetelmillä, koska LES:ssa turbulentin virtauksen suuret pyörteet lasketaan tarkasti ja vain pienet enemmän isotrooppiset pyörteet mallinnetaan.

Käytettäessä LES simulointia kaikki kemialliset reaktiot tapahtuvat laskentahilaa pienemmissä kokoluokissa, jolloin ei ole suoranaista hyötyä LES:n tarkasti lasketuista isoista pyörteistä, vaikka tarkempi sekoitusmalli useimmiten antaaakin parempia tuloksia. Koska kemialliset reaktiot tapahtuvat kokonaan hilaa pienemmissä pituusskaaloissa, ne pitää kokonaisuudessaan mallintaa. Monet LES palamismallit ovat muunnoksia jo aikaisemmin käytetyistä malleista.

LES yhteydessä on flamelet-pohjaisilla malleilla kova noste tutkijoiden keskuudessa, koska niillä voidaan tehokkaasti pienentää palamisen mallinnuksen tuomaa laskennallista kuormaa jo valmiiksi paljon laskentaa vaativaan LES mallinnukseen. Flamelet-malleilla on kuitenkin muutamia selkeitä heikkouksia, kun sitä sovelletaan todellisten polttolaitteiden mallintamiseen. Mallit ovat perustapauksessa adiabaattisia kun taas oikeat polttolaitteet eivät ole adiabaattisia eli lämpöeristettyjä. Säteily on useissa tapauksissa yksi tärkeimmistä ellei tärkein lämmönsiirtomuoto polttolaitteissa ja huonteeltaan sellaista, ettei sitä ole helppo flamelet-malleihin sisällyttää. On myös muita tärkeitä ei-adiabaattisia ilmiöitä. Flamelet-mallilla on myöskin hankala käsitellä tilanteita, joissa polttoainetta syötetään eri lämpötiloissa tai eri koostumuksella. Myös ilmansyötössä ilmenee samanlaisia rajoituksia. Työssä esiteltiin menetelmä ei-adiabaattisten ilmiöiden huomioimiseen. Esitelty menetelmä ei kuitenkaan tuo vastausta polttoaineen eri koostumuksien huomioimiseen.

Työssä esiteltiin myös kaksi erilaista sekoitus pohjaista palamismallia. Molemmat mallit perustuvat täydellisesti sekoittuneen reaktorin käsitteeseen. EDC-malli on tunnettu ja useiden tutkijoiden ja suunnittelijoiden onnistuneesti käyttämä malli. Mallilla on hyvin pitkät perinteet ja historia ulottuen aina vuoteen 1976 asti. Panjwani on sovittanut mallin onnistuneesti toimimaan suurten pyörteiden simuloin-

nin kanssa. Toinen EDC:n kanssa samantyyppinen malli on osittain sekoittuneen reaktorin malli, PaSR. Näillä malleilla kaikille reaktioihin osallistuville aineille pitää kirjoittaa ja ratkaista omat siirtoyhtälöt. Hiemankin monimutkaisemmalla kemiallisella reaktiomekanismilla tulee huomattavan monta ratkaistavaa yhtälöä, koska kaikille aineille vaaditaan omat yhtälöt. Malleissa ei kuitenkaan ole flamelet-mallien kaltaisia rajoituksia palamiseen liittyvien fysikaalisten ilmiöiden käsittelylle.

Työn aikana myös mallinnettiin BERL:n poltinta [7]. Mallinnukseen käytettiin avoimenlähdekoodin OpenFOAM [1] CFD kirjastoa, jossa palamismallina on osittain sekoittuneen reaktorin malli. Reaktiivisen tapauksen laskenta osoittautui kuitenkin huomattavan hitaaksi. Hitaus johtui pääasiassa polttimeen geometriasta sekä reunaehdoista. Polttoaine syötetään pienistä aukoista ilman joukkoon hyvin suurella nopeudella kohtisuorasti verrattuna ilmavirtaukseen suuntaan, joka rajoittaa simuloinnissa käytettävän aika-askeleen hyvin pieneksi. Myöskin laskentakoodi osoittautui huomattavan herkäksi kaatumaan. Edellä mainituista tekijöistä johtuen ei diplomityöhön käytettävissä olevan ajan puitteissa saatu julkaisukelpoisia laskentatuloksia.

LÄHTEET

- [1] *OpenFOAM® - The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox*, 2010. <http://www.openfoam.com/>.
- [2] Bray, K.N.C. ja Peters, N.: *Laminar flamelets in turbulent flames*. Teoksessa *Turbulent Reacting Flows*. Academic Press Ltd., 1994.
- [3] D’Errico, G., Ettorre, D. ja Lucchini, T.: *Comparison of Combustion and Pollutant Emission Models for DI Diesel Engines*. SAE Technical Paper Series No. 07NAPLES-90, 2007.
- [4] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. ja Cabot, W.H.: *A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model*. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3(7):1760, 1991, ISSN 08998213.
- [5] Geurts, B. J.: *Elements of direct and large-eddy simulation*. RT Edwards, Inc., 2004.
- [6] Kärrholm, F.P.: *Numerical Modelling of Diesel Spray Injection, Turbulence Interaction and Combustion*. PhD thesis, Chalmers University Of Technology, Göteborg, Sweden, 2008.
- [7] Kaufman, K. C., Fiveland, W. A., Peters, A. A. F. ja Weber, R.: *The BERL 300kW Unstaged Natural Gas Flames with a Swirl-Stabilized Burner. Case 1: Hot-wall Conditions*. tekn. rap., Gas Research Institute, 1994.
- [8] Lesieur, M., Métais, O. ja Comte, P.: *Large-Eddy Simulation of Turbulence*. Cambridge University Press, 2005.
- [9] Liu, F., Guo, H., Smallwood, G.J., Gülder, O.L., and Matovic, M.D.: *A robust and accurate algorithm of the β -pdf integration and its application to turbulent methane-air diffusion combustion in a gas turbine combustor simulator*. *International Journal of Thermal Sciences*, 41(8):763–772, 2002, ISSN 1290-0729.
- [10] Magnussen, B. F.: *Modeling of Pollutant Formation in Gas Turbine Combustors Based on the Eddy Dissipation Concept*. Tianjin, China, 1989.

- [11] Magnussen, B. F.: *The Eddy Dissipation Concept a Bridge Between Science and Technology*. Lisbon, 2005.
- [12] Mahesh, K., Constantinescu, G., Apte, S., Iaccarino, G., Ham, F. ja Moin, P.: *Large-Eddy Simulation of Reacting Turbulent Flows in Complex Geometries*. Journal of Applied Mechanics, 73(3):374–381, 2006.
- [13] Martín, M.P., Piomelli, U., and Candler, G.: *Subgrid-Scale Models for Compressible Large-Eddy Simulations*. Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 13(5):361–376, 2000.
- [14] Moin, P. ja Apte, S.: *Large-Eddy Simulation of Realistic Gas Turbine Combustors*. AIAA Journal, 44(4):698—708, 2006.
- [15] Nordin, N.: *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*. PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 2001.
- [16] Panjwani, B., Ertesvåg, I. S., Gruber, A. ja Rian, K. E.: *Turbulence combustion closure model based on the Eddy Dissipation Concept for Large Eddy Simulation*. 2010.
- [17] Peters, N.: *Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion*. Progress in Energy and Combustion Science, 10(3):319–339, 1984, ISSN 0360-1285.
- [18] Pierce, C. D. ja Moin, P.: *Progress-Variable Approach for Large-Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Combustion*. Journal of Fluid Mechanics, 504:73–97, 2004.
- [19] Pitsch, H.: *A c++ computer program for 0-D combustion and 1-D laminar flame calculations*, 1998.
- [20] Pitsch, H.: *Large-eddy simulation of turbulent combustion*. The Annual Review of Fluid Mechanics, 38:453–482, 2006.
- [21] Pitsch, H., Cha, C. M. ja Fedotov, S.: *Flamelet Modeling of Non-Premixed Turbulent Combustion with Local Extinction and Re-Ignition*. Combustion Theory and Modelling, 7:317—332, 2003.
- [22] Poinso, T. ja Veynante, D.: *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [23] Pope, S. B.: *Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation*. Combustion Theory and Modelling, 1(1):41–63, 1997.

- [24] Pope, S.B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 1 p., 2000, ISBN 0521598869.
- [25] Raiko, R., Kurki-Suonio, I., Saastamoinen, J. ja Hupa, M. (toim.): *Poltto ja palaminen*. International Flame Research Foundation(IFRF) Suomen kansallinen osasto, 2002.
- [26] Ravikanti, M., Malalasekera, W., Hossain, M. ja Mahmud, T.: *Flamelet Based NO_x -Radiation Integrated Modelling of Turbulent Non-premixed Flame using Reynolds-stress Closure*. Flow, Turbulence and Combustion, 81(1-2):301–319, 2007, ISSN 1386-6184.
- [27] Sadasivuni, S.: *LES modelling of non-premixed and partially premixed turbulent flames*. A Doctoral Thesis, Loughborough University, UK, 2009.
- [28] Sagaut, P.: *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer-Verlag, 2 p., 2004.